



Transformation de Fourier Discrète et Calculs Radiocristallographiques

Alain Lifchitz

► To cite this version:

Alain Lifchitz. Transformation de Fourier Discrète et Calculs Radiocristallographiques. Physique [physics]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1974. Français. NNT: . tel-00115250

HAL Id: tel-00115250

<https://theses.hal.science/tel-00115250>

Submitted on 28 Nov 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE présentée
pour l'obtention
du
DIPLOME de DOCTEUR de 3e CYCLE
à
L'UNIVERSITE DE PARIS VI

Spécialité : CRISTALLOGRAPHIE-INFORMATIQUE

Mention : SCIENCES PHYSIQUES

par Monsieur Alain LIFCHITZ

Sujet de la Thèse : TRANSFORMATION DE FOURIER DISCRETE ET CALCULS
RADIOCRISTALLOGRAPHIQUES

soutenue le 10 Juin 1974 devant la Commission composée de :

Monsieur J. WYART.....	Président
Monsieur A. AUTHIER.....	Examineur
Monsieur H. CURIEN.....	"
Monsieur M. FRANÇON.....	"
Monsieur A. RIMSKY.....	Invité

R E M E R C I E M E N T S

Ce travail a été effectué au Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie de l'Université de Paris VI. J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur J. WYART qui m'y a accueilli, m'a témoigné une constante bienveillance en prodiguant de sages conseils tout au long de ce travail qu'il a patronné et enfin m'a fait l'honneur de présider le Jury de cette thèse.

Je remercie vivement Monsieur le Professeur A. AUTHIER pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail en participant au Jury.

J'exprime mes plus vifs remerciements à Monsieur le Professeur H. CURIEN qui, malgré ses lourdes responsabilités, a bien voulu me témoigner son intérêt pour ce mémoire, en acceptant la charge supplémentaire de le juger.

Je souhaite exprimer toute ma reconnaissance à Monsieur le Professeur M. FRANÇON dans le laboratoire duquel j'ai eu le plaisir d'être initié à la recherche, et qui m'a apporté une nouvelle fois son sympathique soutien en acceptant immédiatement de se joindre au Jury.

Monsieur A. RIMSKY, dont l'enthousiasme communicatif m'a constamment stimulé, a suscité mon intérêt pour l'étude radiocristallographique des molécules biologiques, et m'a fait profiter, au cours de conversations presque quotidiennes, de ses connaissances ainsi que de sa grande expérience. Je lui en suis très reconnaissant.

Que Messieurs J. BERTHOU et A. LAURENT reçoivent aussi toute ma reconnaissance pour leurs encouragements renouvelés et l'aide précieuse qu'ils m'ont apportée tout au long de ce travail.

Mademoiselle M. CANAPLE a assumé avec dévouement et compétence la lourde tâche d'une dactylographie parfois "acrobatique". Je l'en remercie chaleureusement.

Enfin, j'exprime ma gratitude à tous ceux, et notamment le personnel du laboratoire qui, directement ou indirectement, m'ont permis de mener à bien ce travail.

TABLE DES MATIERES

PREAMBULE.....	1
CHAPITRE I - Echantillonnage des fonctions périodiques et transformation de FOURIER discrète....	
1. Introduction.....	3
2. Phénomènes parasites liés aux calculs numé- riques et à la mesure.....	5
2.1. Phénomènes de diffraction.....	5
2.2. Contraintes spécifiques au calcul numérique.....	7
2.2.1. Quantification.....	7
2.2.2. Echantillonnage.....	8
3. Echantillonnage et reconstruction d'une fonction réelle périodique.....	12
4. Propriétés vectorielles des fonctions $S -$ Conséquences.....	14
4.1. Dimension de l'espace vectoriel des fonctions périodiques à support borné..	14
4.2. Dimension de l'espace vectoriel des fonctions d'interpolation $S(K,x)$	16
4.2.1. K impair.....	16
4.2.2. K pair.....	17
4.3. Conséquence pour les échantillons de la condition de NYQUIST.....	19
4.4. Conservation du produit scalaire, dans le cas d'une base de fonctions d'inter- polation non orthogonale (K pair).....	20
4.5. L'opération d'échantillonnage $E(K)$	22
4.5.1. Linéarité.....	22
4.5.2. Inversibilité.....	22
4.5.3. Ré-échantillonnage et échantil- lonnage non uniforme.....	22

5. Transformation de FOURIER continue, échantil- lonnage et transformation de FOURIER discrète (TFD).....	24
5.1. Intervention de la TFD.....	24
5.2. Substitution des calculs discrets aux calculs continus.....	27
CHAPITRE II - Calcul rapide du produit de convolution discret.....	31
1. Convolution discrète aperiodique.....	31
2. Comparaison avec la convolution discrète cyclique.....	33
CHAPITRE III - Réduction de moitié du volume mémoire et de la durée de calcul dans l'usage des algorithmes de transformation de FOURIER rapide (FFT).....	38
1. Introduction.....	38
2. Les méthodes de transformation de FOURIER en radiocristallographie.....	39
2.1. Méthode conventionnelle.....	41
2.2. Utilisation directe des algorithmes FFT(K).....	42
2.3. Compactage suivi de FFT(K/2) et trans- formation \hat{C}^{-1}	43
3. La réduction des calculs.....	43
3.1. La transformation C.....	43
3.1.1. C linéaire.....	44
3.1.2. C unitaire.....	44
3.2. La transformation \hat{C}	44
3.3. Expression explicite de \hat{C} et \hat{C}^{-1}	46
3.4. Applications des transformations C, \hat{C} et \hat{C}^{-1} à la réduction des calculs.....	47
CONCLUSION ET PROSPECTIVE	49

REFERENCES.....	50
APPENDICE 1 - Définition et quelques propriétés de la transformation de FOURIER discrète	I.1
APPENDICE 2 - Fonctions d'interpolation $S(K,x)$	II.1
APPENDICE 3 - "Listings" des sous-programmes ABC, REV et MIR	III.1

P R E A M B U L E

L'étude des macromolécules en radiocristallographie nécessite souvent des calculs d'une ampleur telle, qu'ils ne peuvent se conduire sans de nombreuses difficultés, dont l'une est leur durée excessive. Nous en sommes venus rapidement à considérer tout l'intérêt que pouvait présenter l'application dans ce domaine des algorithmes de transformation de FOURIER rapide (Fast FOURIER Transform (FFT) ; COOLEY & TUKEY, 1965).

Par leur élégante organisation du calcul de la transformation de FOURIER discrète (TFD), ces algorithmes permettent, ce qui pourrait sembler au premier abord paradoxal, une réduction considérable du nombre d'opérations arithmétiques théoriquement prévisibles par l'application directe de la formule de définition. La puissance des méthodes FFT s'avère telle que, contrairement aux conceptions antérieures qui tendaient à éviter les calculs de transformation de FOURIER jugés à juste titre longs et pénibles, elle incite à rechercher systématiquement la substitution d'une ou même plusieurs évaluations numériques de TFD à tout calcul cristallographique de quelque importance.

Le calcul numérique de la TFD rendu alors aisé et créant ainsi un nouvel état de fait, il nous a paru utile de chercher à mieux connaître les possibilités de cette transformation unitaire. Celle-ci très apparentée à la transformation de FOURIER continue souvent invoquée dans l'analyse des calculs radiocristallographiques, peut présenter les mêmes avantages que cette dernière, tout en étant néanmoins plus réaliste, quant à la poursuite des calculs numériques proprement dits, de par son adaptation particulière à leur caractère essentiellement discret.

Nous examinerons dans ce mémoire sans prétendre à l'exhaustivité quelques apports de la TFD tant à la conception qu'à la pratique des calculs.

Après avoir abordé la question du passage des relations mathématiques idéales au déroulement effectif des calculs numériques en ordinateur, processus impliquant nécessairement une opération d'échantillonnage des représentations mathématiques continues, le chapitre I montrera que la TFD substitue à la transformation de FOURIER continue, naturellement et sans approximation propre, des expressions portant sur un nombre limité de valeurs discrètes, tant dans l'espace réciproque que dans l'espace direct.

Dans le chapitre II, nous montrerons que le théorème de BOREL discret permet non seulement le calcul élégant et performant, grâce à la FFT, du produit de convolution discret périodique mais également, avec quelques précautions, celui du produit de convolution apériodique apparaissant dans certaines applications particulières proches du filtrage numérique.

L'utilisation des différents algorithmes FFT pose souvent en pratique quelques difficultés résultant de leur manque de souplesse, plus particulièrement sous leur forme initiale. Le chapitre III propose une transformation linéaire incluant la symétrie hermitienne (loi de FRIEDEL) et conduisant ainsi à une réduction substantielle du volume des calculs numériques.

L'appendice 1 rappelle la définition et réunit quelques propriétés importantes de la TFD, alors que l'appendice 2 développe les expressions des fonctions de reconstruction impliquées dans le développement du chapitre I. Enfin, l'appendice 3 comporte le "listing" d'un système de trois sous-programmes généraux écrits en FORTRAN IV, permettant le calcul des TFD unidimensionnelles, bidimensionnelles et tridimensionnelles, par FFT avec des performances intéressantes.

ECHANTILLONNAGE DES FONCTIONS PERIODIQUES ET TRANSFORMATION DE FOURIER DISCRETE

C H A P I T R E I

1. INTRODUCTION

Pour plus de clarté, nous raisonnerons ici, et sauf mention contraire, sur des fonctions et des suites unidimensionnelles.

Le radiocristallographe se trouve souvent confronté, dans sa pratique, à des calculs de transformation de FOURIER continue (désignée dans ce qui suit par l'abréviation TF) de la forme :

$$\hat{X}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} X(x) e^{-i2\pi xu} dx \quad (I.1)$$

conséquence du théorème de MICHELSON-LORD RAYLEIGH (GAY, 1961, p. 17), et :

$$X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{X}(u) e^{+i2\pi xu} du \quad (I.1')$$

qui définit la TF inverse, x et u désignant respectivement des variables de l'espace direct et réciproque.

A l'exclusion de quelques cas particuliers, dont par exemple l'étude radiocristallographique des corps amorphes, $X(x)$ peut être généralement assimilée à une fonction idéale infiniment périodique de période 1, à la condition toutefois de choisir la période de cette fonction comme unité de mesure sur l'axe des " x ". Cette périodicité implique la propriété connue pour le spectre $\hat{X}(u)$ d'être discret, formé de distributions de DIRAC équidistantes (ARSAC, 1961, p. 106) : $\hat{X}(u)$ est identiquement

nul pour u différent d'un entier relatif " q ". Définissant ainsi le développement en série de FOURIER de $X(x)$, les relations (I.1) et (I.1') deviennent dans ces conditions :

$$\hat{X}(q) = \int_{-1/2}^{+1/2} X(x) e^{-i2\pi qx} dx \quad ; \quad q \in \mathbb{Z} \quad (I.2)$$

$$X(x) = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \hat{X}(q) e^{+i2\pi qx} \quad (I.2')$$

La périodicité de $X(x)$ s'avère une propriété essentielle, bénéfique au radiocristallographe, en ce qu'elle lui permet de réduire dans une proportion considérable (théoriquement infinie...) la collection des informations, ainsi que les calculs numériques et approximations qui leurs sont associées, par rapport à ce qu'auraient pu laisser prévoir les relations générales (I.1) et (I.1') :

- Lorsque la fonction continue $X(x)$ n'est pas périodique, l'une au moins des deux fonctions $X(x)$ et $\hat{X}(u)$ possède un support infini ; inversement, lorsque $X(x)$ est périodique, on ne doit la considérer que sur la longueur limitée d'une période, sa largeur de spectre pouvant cependant rester parfaitement finie.

- Dans (I.2) et (I.2'), $\hat{X}(u)$ n'est à considérer que pour les seules valeurs q discrètes et entières de la variable continue u , contrairement à son emploi dans (I.1) et (I.1').

- La sommation sur toute la droite réelle, présente dans la relation (I.1), se réduit par (I.2) à l'intervalle d'une période $[-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}]$ de $X(x)$.

- L'intégrale (I.1') devient en (I.2') une somme discrète, qui la rend bien plus adaptée au calcul numérique (mis à part son intervalle de sommation infini...).

2. PHENOMENES PARASITES LIES AUX CALCULS NUMERIQUES ET A LA MESURE

Au caractère "naturel" de la discrétion du spectre $\hat{X}(q)$ et de la sommation sur un intervalle limité dans la relation (I.2), dû à la nature intrinsèquement périodique du cristal mesuré, s'oppose l'aspect artificiel d'opérations de limitation et de discrétisation, nécessitées pour la réalisation du calcul numérique de (I.2') et (I.2), celles-ci provoquant par là même divers effets parasites que l'on s'efforcera de limiter.

2.1. Phénomènes de diffraction

L'évaluation de $X(x)$ par (I.2') impliquerait, en toute rigueur, la sommation sur un nombre infini de valeurs de $\hat{X}(q)$ (et l'évaluation des $\hat{X}(q)$, un nombre infini de calculs de (I.2)...), travail évidemment impossible, ne serait-ce qu'au niveau initial de la collecte des données nécessairement effectuée sur un nombre fini de "réflexions" situées à l'intérieur d'une sphère de l'espace réciproque, de rayon limité défini par la longueur d'onde des rayons X employés.

Un moyen de tourner cette difficulté consiste à fixer q_0 , valeur entière positive telle que :

$$|q| > q_0 > 0 \Rightarrow \hat{X}(q) \approx 0 \quad (I.3)$$

c'est-à-dire qu'il est possible de considérer la fonction $X(x)$ comme possédant une TF à support borné, et qu'ainsi (I.2') peut s'écrire :

$$X(x) = \sum_{q=-q_0}^{+q_0} \hat{X}(q) e^{+i2\pi qx} \quad (I.4)$$

L'hypothèse (I.3), d'apparence arbitraire, est en fait légitimée par des considérations sur la répartition spectrale de l'énergie, dans le cas d'une fonction $X(x)$ résultant d'une mesure physique concrète ; malheureusement, dans la pratique, ces considérations conduisent généralement à des valeurs de q_0 trop élevées.

Par ailleurs, l'application "brutale" de la relation (I.4) hors du respect de (I.3), produit souvent des distorsions importantes, par rapport à $X(x)$, des valeurs $X_t(x)$ ainsi obtenues. Les oscillations dont $X_t(x)$ est affectée, nommées phénomènes de diffraction, depuis longtemps étudiés et abondamment décrits dans la littérature spécialisée, comme par exemple le phénomène de GIBBS (ANGOT, 1957, p. 68), concernant pleinement le radiocristallographe (JAMES, 1948), pour qui, mené dans ces conditions, le calcul de $X(x)$ peut arriver à perdre beaucoup de sa finalité (notamment lors du calcul de fonctions de PATTERSON pour des molécules comportant un nombre important d'atomes), bien que ce phénomène de diffraction s'avère finalement moins sévère à 3 dimensions, qu'à 2 et 1 dimensions (op. cit.).

On sera donc conduit à un compromis, cherchant à minimiser les conséquences des effets de diffraction pour une valeur encore acceptable de q_0 , c'est-à-dire à satisfaire la condition (I.3) pour q'_0 donnée inférieure à q_0 : ce que permet d'obtenir une pondération convenable $A(q)$ des termes $\hat{X}(q)$, opération nommée "apodisation" (introduite à l'origine en optique) (ARSAC, 1961, p. 260), telle que :

$$\hat{A}(q) \equiv 0 \quad \text{pour} \quad |q| > q'_0 > 0 \quad ; \quad q_0 > q'_0 > 0 \quad (\text{I.5})$$

Cette manière de procéder offre l'avantage de s'interpréter aisément, en termes mathématiques, comme le produit de convolution de la fonction idéale recherchée $X(x)$ par une fonction noyau de convolution $A(x) = \text{TF}[\hat{A}(u)]$ choisie à support étroit, ou encore, ce qui équivaut, comme une opération de filtrage linéaire des hautes fréquences spatiales. Soit ainsi les fonctions périodiques de période unité, $X_t(x)$ et $X_a(x)$, définies par :

$$X_t(x) = \sum_{q=-q'_0}^{q'_0} \hat{X}(q) e^{+i2\pi qx} \quad (\text{I.6})$$

$$X_a(x) = \sum_{q=-q'_0}^{q'_0} \hat{A}(q) \hat{X}(q) e^{+i2\pi qx} \quad (\text{I.7})$$

$X_a(x)$ pourra, par un choix adéquat des coefficients $\hat{A}(q)$, constituer une bien meilleure approximation de $X(x)$, que la simple fonction $X_t(x)$. Le critère choisi pour juger de la qualité finale de l'approximation conditionne essentiellement ce choix de la loi $\hat{A}(q)$; un procédé de sommation $\hat{A}(q)$ ne peut pas, en général, être optimal parallèlement pour tous les critères considérés (ARSAC, 1961, p. 278 ; RIFE & VINCENT, 1970). Le cristallographe, quant à lui, recherchera par exemple des pics parasites d'intensité minimale pour une "Patterson" ou une densité électronique, ou bien au contraire une bonne localisation des pics utiles, etc...

En conséquence, nous admettrons dans ce qui suit qu'en tout état de cause la TF de $X(x)$ ne peut être qu'à support borné ; une fois choisi le procédé de sommation $\hat{A}(q)$, nous considérerons ainsi comme rigoureuse la relation (I.4) grâce aux correspondances :

$$\begin{cases} A(q)\hat{X}(q) & \rightarrow & \hat{X}(q) \\ X_a(x) & \rightarrow & X(x) \\ q'_0 & \rightarrow & q_0 \end{cases} \quad (I.8)$$

Cette attitude n'a rien d'arbitraire et prend simplement acte de notre connaissance nécessairement finie de l'espace réciproque. Cette unique et inévitable approximation étant acquise, on pourra constater ultérieurement qu'en toute rigueur, les calculs peuvent se mener théoriquement et pratiquement sur un nombre fini de données discrètes.

2.2. Contraintes spécifiques au calcul numérique

Pour transiter à travers un système informatique, $X(x)$ et $\hat{X}(q)$ doivent prendre une forme digitale, caractéristique spécifique aux méthodes numériques. Cette condition imposera une discrétisation de deux types essentiellements différents :

2.2.1. Quantification

Chaque donnée discrète $X(x_1)$ ou $\hat{X}(q_1)$ possible devra s'exprimer par un nombre entier fini (deux nombres dans le cas d'une

donnée complexe) ; il s'agit de l'opération de quantification, prenant en compte l'information nécessairement finie transportée par des données physiques réelles, c'est-à-dire la précision naturellement limitée de la mesure.

La précision avec laquelle ces valeurs sont mémorisées et traitées dépend alors du mode de représentation adopté, ainsi que du nombre de bits réservés à leur stockage ; les ordinateurs scientifiques actuels, usant d'une représentation semi-logarithmique dite "virgule flottante" sur un minimum de 24 à 32 bits, fournissent de l'ordre de cinq ou six chiffres significatifs, précision en général tout à fait suffisante pour les calculs cristallographiques envisagés (en particulier lorsque ceux-ci peuvent profiter du gain de précision apporté par la FFT, comparativement aux méthodes traditionnelles (OPPENHEIM & WEINSTEIN, 1972)), et dans tous les cas très supérieure à l'incertitude sur la mesure elle-même, nous incitant donc à orienter notre attention vers des phénomènes parasites plus importants (en intensité).

2.2.2. Echantillonnage

Outre le fait que l'ordinateur s'accommode mal de l'être mathématique, purement abstrait, qu'est la fonction continue, réelle ou complexe, $X(x)$ de la variable réelle continue " x ", la théorie du signal (GABOR, 1953 ; MACCHI, 1973) indique qu'une telle fonction, lorsqu'elle exprime le résultat d'une mesure physique concrète, ne peut correspondre qu'à un nombre fini de données indépendantes définissant ses degrés de liberté.

Ces considérations, tant pratiques que théoriques, conduisent donc à concevoir une nouvelle opération de discrétisation, l'échantillonnage, portant sur la fonction $X(x)$, et s'appuyant sur les résultats du théorème d'échantillonnage de WHITTAKER-SHANNON-NYQUIST-KOTIELNITKOW qui établit la relation (I.9), assortie de sa condition de validité (I.9') :

$$X(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} X(k\Delta x) \operatorname{sinc}\left(\frac{x}{\Delta x} - k\right) \quad (\text{I.9})$$

$$\text{pour } 0 < \Delta x < \Delta x(\text{opt}) = \frac{1}{2q_0} \quad (\text{I.9'})$$

posant comme il est d'usage :

$$\text{sinc } x = \frac{\sin \pi x}{\pi x} \quad (\text{I.10})$$

et où $2q_0$ désigne la largeur de bande limitée de la fonction réelle $X(x)$, c'est-à-dire la largeur du spectre $\hat{X}(u)$, TF de $X(x)$, supposé à support borné :

$$\hat{X}(u) = 0 \text{ pour } u \notin [-q_0, +q_0] \quad (\text{I.11})$$

On pourra, au sujet de ce théorème, faire les constatations suivantes :

- Grâce à la formule d'interpolation explicite (I.9), $X(x)$ est connue de façon univoque et peut s'évaluer rigoureusement (contrairement aux possibilités d'autres formules d'interpolation), en tout point de l'intervalle $]-\infty, +\infty[$, à partir de l'unique connaissance des échantillons discrets $X(k\Delta x)$. Ce résultat constitue une conséquence fondamentale de la largeur limitée du spectre $\hat{X}(u)$. Dans ce qui suit, nous dénommerons souvent reconstruction, ce type d'interpolation rigoureuse.
- La fonction interpolée définie par (I.9) "passe" par les points d'échantillonnage : en effet, puisque pour deux nombres entiers n et n_0 , $\text{sinc}(n - n_0) = \delta_{n,n_0}$ (δ_{n,n_0} symbole de Kronecker), pour les abscisses $x = k_0\Delta x$, (I.9) fournit le résultat $X(x) = X(k_0\Delta x)$.
- La compression de données ainsi obtenue, sans aucune perte d'information comme en témoigne (I.9), est d'une efficacité (au point de vue du taux d'échantillonnage nécessaire à la reconstruction univoque du signal) proportionnelle à la taille du pas d'échantillonnage Δx , l'optimum (le taux d'échantillonnage le plus faible) correspondant au pas de NYQUIST $\Delta x(\text{opt}) = \frac{1}{2q_0}$; cette limite supérieure du pas Δx ne peut en aucun cas être dépassée, ni même atteinte, sans perte irréversible d'informations sur $X(x)$.

Il est aisé de se convaincre intuitivement de la nécessité du respect de l'inégalité stricte dans (I.9'), par un contre-exemple relatif à un cas typiquement "pathologique".

Soit la fonction $X(x) = \sin 2\pi q_0 x$, échantillonnée pour $|x| = 0, \Delta x, 2\Delta x, \dots$. Dans l'hypothèse où l'égalité puisse être atteinte dans (I.9'), supposons $\Delta x = \Delta x(\text{opt}) = \frac{1}{2q_0}$ et par conséquent $X(k.\Delta x) = 0$ pour toutes les valeurs entières de k (fig. I.1) ; ces échantillons pouvant provenir tout aussi bien de la fonction $X(x) \equiv 0$ (qui vérifie la condition de NYQUIST...), rendent le choix entre cette fonction et la fonction initiale, ambigu, et la reconstruction de cette dernière, impossible, par la formule d'interpolation (I.9). Inversement, si l'on suppose maintenant que $\Delta x = \Delta x(\text{opt}) - \epsilon$ avec ϵ positif arbitrairement petit, il existera nécessairement des valeurs d'échantillons $X(k.\Delta x)$ non nulles, levant ainsi totalement l'ambiguïté de choix précédente.

- Les bornes de sommation infinies, associées à la décroissance lente de la fonction $\text{sinc} x$, rendent la formule de reconstruction (I.9) d'un emploi pratique délicat (sauf dans le cas particulier des fonctions $X(x)$ périodiques étudié au paragraphe suivant).

Par ailleurs, le théorème d'échantillonnage a donné lieu à de nombreuses généralisations, notamment multidimensionnelles, qui n'imposent aucunement un pas d'échantillonnage uniforme. Il s'avère ainsi possible, dans le cas bidimensionnel par exemple, de montrer (GAARDER, 1972) qu'un échantillonnage hexagonal possède la même efficacité qu'un échantillonnage rectangulaire. Cependant, une expression analogue à (I.9'), établie dans le cas d'un pas constant, conduira toujours, pour toutes les dimensions, à la valeur minimale du taux d'échantillonnage.

Nous ne considérerons dans ce qui suit que l'échantillonnage à pas uniforme constant, qui consiste dans le cas tridimensionnel de coordonnées cartésiennes liées aux axes cristallins, à choisir des échantillons situés aux noeuds d'un réseau dont les 3 translations primitives sont respectivement parallèles aux axes de référence ; cette situation correspond à la quasi-totalité des cas rencontrés actuellement, bien que d'ingénieuses représentations adaptées aux propriétés de périodicité et symétrie cristallines, faisant notamment appel aux coordonnées polaires, aient été proposées (ROSE & RIMSKY, 1949).

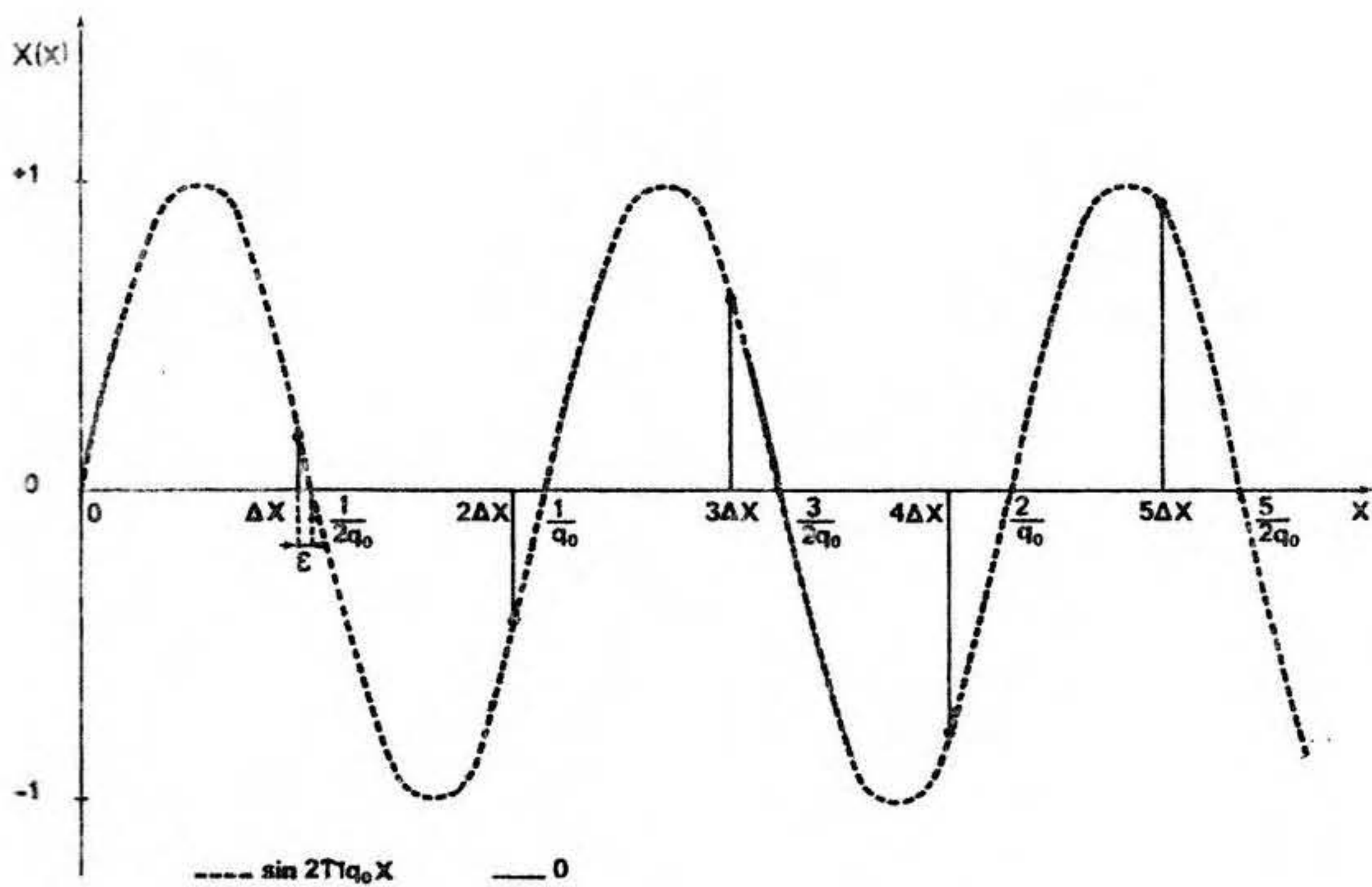


Fig. 1.1. Nécessité d'un pas d'échantillonnage Δx inférieur au pas de NYQUIST

$$\Delta x(\text{opt}) = \frac{1}{2q_0}.$$

3. ECHANTILLONNAGE ET RECONSTRUCTION D'UNE FONCTION REELLE PERIODIQUE

La propriété essentielle de périodicité de $X(x)$ ayant déjà produit une simplification de (I.1) et (I.1') (au sens d'un hypothétique calcul numérique), pour conduire aux relations (I.2) et (I.2'), va maintenant permettre de déduire de (I.9), relation pour laquelle cette propriété n'est pas encore intervenue, une formule d'interpolation rigoureuse qui possède l'avantage de ne faire appel qu'à un nombre limité d'échantillons discrets.

Soit la fonction continue $X(x)$, infiniment périodique, échantillonnée au pas Δx tel que :

$$\Delta x = \frac{1}{K} ; K \text{ entier naturel non nul} \quad (\text{I.12})$$

La période 1 de cette fonction contient exactement K échantillons ; la condition de NYQUIST (I.9') devient :

$$2q_0 + 1 \leq K \quad (\text{I.13})$$

Dans ces hypothèses, (I.9) peut prendre la forme particulière :

$$X(x) = \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \left[\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \text{sinc}(Kx - k - K\ell) \right] \quad (\text{I.14})$$

$X\left(\frac{k}{K}\right)$ est en général non nul et l'expression (I.14) prenant une valeur finie, la somme infinie entre crochets converge nécessairement pour tout x .

Posant pour cette somme :

$$S(K, x) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \text{sinc}(Kx - K\ell) \quad (\text{I.15})$$

l'expression (I.9) peut maintenant prendre la forme d'une somme portant sur un nombre fini K de termes :

$$X(x) = \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) S\left(K, x - \frac{k}{K}\right) \quad (\text{I.16})$$

Pertant de la définition (I.15) et des propriétés de la fonction sincx, on peut aisément déduire les propriétés suivantes de $S(K,x)$:

$$\text{- fonction périodique de période 1 : } S(K, x + 1) = S(K, x) \quad (\text{I.17})$$

$$\text{- fonction paire : } S(K, -x) = S(K, x) \quad (\text{I.18})$$

$$\text{- valeurs particulières : } S(K, \frac{k}{K}) = 1 \text{ pour } k \text{ entier multiple de } K \quad (\text{I.19})$$

$$S(K, \frac{k}{K}) = 0 \text{ pour } k \text{ entier non multiple de } K \quad (\text{I.19'})$$

Comme on peut le constater, ces propriétés de $S(K,x)$ présentent une parfaite cohérence avec les propriétés légitimement attendues de la relation (I.16) : (I.19) et (I.19') conduisent par exemple, pour $x = k/K$, à l'identité des deux membres de cette formule d'interpolation, qui restitue alors les valeurs des échantillons initiaux.

Lors du cas fréquent où $X(x)$ doit s'évaluer pour une suite de valeurs de x en progression arithmétique de raison $1/K$:

$$x = x_0 + \frac{\ell}{K} ; \ell = 0, 1, \dots, K-1 ; x \text{ réel arbitraire} \quad (\text{I.20})$$

la périodicité (I.17) de la fonction $S(K,x)$ permet encore de réécrire (I.15) sous la forme d'une convolution cyclique discrète ; en effet, posant encore :

$$\begin{aligned} X_k(K, x) &= X(x + \frac{k}{K}) \\ R_k(K, x) &= S(K, x + \frac{k}{K}) \end{aligned} \quad (\text{I.21})$$

dans ce cas particulier, la formule de reconstruction (I.16) prend la forme :

$$X_\ell(K, x_0) = \sum_{k=0}^{K-1} X_k(K, 0) R_{\ell-k}(K, x_0) \quad (\text{I.22})$$

puis avec la périodicité K de R_k se déduisant de celle de (I.17) de la fonction $S(K,x)$, et pour les suites périodiques de période K , $\{X_k\}$ et $\{R_k\}$, associées respectivement à $X_k(K,x)$ et $R_k(K,x)$, cette expression devient symboliquement :

$$\{X_k(K, x_0)\} = \{X_k(K, 0)\} * \{R_k(K, x_0)\} \quad (\text{I.23})$$

Bien que dans la majorité des cas le produit de convolution cyclique (I.23) ne soit pas évalué directement, mais plutôt par passage dans l'espace réciproque, grâce au théorème de BOREL discret (A1.8), la forme explicite de R_k , et donc celle de $S(K,x)$, peut s'avérer utile dans quelques cas isolés ; l'appendice 2 développe le calcul des deux expressions possibles de $S(K,x)$, liées à la parité de K .

Les diverses fonctions de reconstruction présentent entre elles beaucoup d'analogies. En effet, la lecture du tableau récapitulatif (Tab. I.1), s'appuyant sur les résultats de l'appendice 2, permet de constater que ces fonctions ne diffèrent que par l'expression de leurs dénominateurs πx , $\sin \pi x$ et $\operatorname{tg} \pi x$; de plus, ceux-ci prennent des valeurs très proches pour $|x| \ll \frac{1}{2}$, incitant lors d'applications particulières à considérer (I.16), plus proprement adaptée au calcul numérique, comme l'approximation de (I.9).

Des relations comme (I.4) et (I.23), soulèvent la question des liens existant entre la TF continue, la TFD, et les fonctions de reconstruction ; ceci fera l'objet de l'étude abordée dans les paragraphes suivants qui va incidemment et contrairement à ce qui précède mettre en relief les différences de propriétés des fonctions \tilde{S} et \hat{S} .

4. PROPRIETES VECTORIELLES DES FONCTIONS S - CONSEQUENCES

Ce paragraphe étudiera en fait quelques conséquences de la dimension finie de l'espace vectoriel des fonctions périodiques réelles de spectre borné.

4.1. Dimension de l'espace vectoriel des fonctions périodiques à support borné

La relation (I.2) définissant le développement en série de FOURIER de $X(x)$ peut se réécrire immédiatement comme un produit scalaire en adoptant les notations (A2.14) :

$$\hat{X}(q) = \langle X(x), e^{i2\pi qx} \rangle \quad ; \quad q \in \mathbb{Z} \quad (\text{I.24})$$

TABLEAU I.1. Échantillonnage uniforme d'une fonction réelle

1	Nature de la fonction $X(x)$	non périodique	périodique de période unité
2	Nombre d'échantillons	infini	K impair
3	Pas d'échantillonnage	Δx	$\Delta x = 1/K$
4	Condition de NYQUIST	$ u > 1/\Delta x \Rightarrow \hat{X}(u) = 0$	$2 q > K-1 \Rightarrow \hat{X}(q) = 0$
4'	Contrainte sur les valeurs échantillonnées	aucune	$\sum_{k=0}^{K-1} (-1)^k X(k\Delta x) = 0$
5	Fonction d'interpolation	$\text{sinc}(\frac{x}{\Delta x}) = \Delta x \frac{\sin \pi(x/\Delta x)}{\pi x}$	$\hat{X}(\frac{1}{\Delta x}, x) = \Delta x \frac{\sin \pi(x/\Delta x)}{\text{tg} \pi x}$
6	Relation d'orthogonalité : (les fonctions $\hat{X}(\frac{1}{\Delta x}, x-k\Delta x)$ ne sont pas orthogonales)	$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc}(\frac{x-k\Delta x}{\Delta x}) \text{sinc}(\frac{x-l\Delta x}{\Delta x}) dx = \Delta x \delta_{k,l}$	$\int_{-1/2}^{+1/2} \hat{X}(\frac{1}{\Delta x}, x-k\Delta x) \hat{X}(\frac{1}{\Delta x}, x-l\Delta x) dx = \Delta x [\delta_{k,l} - (-1)^{k-l} \frac{1}{2}]$
7	Dimension de l'espace vectoriel des fonctions interpolées	infinie	K-1
8	Dimension de l'espace vectoriel des fonctions d'interpolation	infinie	K
9	Formule de reconstruction	$X(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} X(k\Delta x) \text{sinc}(\frac{x-k\Delta x}{\Delta x})$	$X(x) = \sum_{k=0}^{K-1} X(k\Delta x) \hat{X}(\frac{1}{\Delta x}, x-k\Delta x)$
10	Formule d'échantillonnage	$X(k\Delta x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{-\infty}^{+\infty} X(x) \text{sinc}(\frac{x-k\Delta x}{\Delta x}) dx$	$X(k\Delta x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{-1/2}^{+1/2} X(x) \hat{X}(\frac{1}{\Delta x}, x-k\Delta x) dx$
11	Conservation du produit scalaire	$\int_{-\infty}^{+\infty} X(x) Y(x) dx = \Delta x \sum_{k=-\infty}^{+\infty} X(k\Delta x) Y(k\Delta x)$	$\int_{-1/2}^{+1/2} X(x) Y(x) dx = \Delta x \sum_{k=0}^{K-1} X(k\Delta x) Y(k\Delta x)$

Puisque d'autre part, par nature même de la TF :

$$\langle e^{i2\pi q'x}, e^{i2\pi qx} \rangle = \delta_{q',q} \quad (I.25)$$

$\hat{X}(q)$ peut être considéré comme la projection du vecteur $X(x)$ sur le vecteur $e^{i2\pi qx}$ de la base orthonormée (I.25) de l'espace vectoriel des fonctions de période unité, permettant de retrouver (évidemment...) ainsi la formule de reconstruction TF inverse (I.2'). Les valeurs en général complexes $\hat{X}(q)$ ne sont plus linéairement indépendantes lorsque l'on suppose $X(x)$ réelle, la loi de FRIEDEL (symétrie hermitienne) imposant :

$$\hat{X}(-q) = \hat{X}^*(q) \quad (I.26)$$

La dimension de cet espace reste néanmoins infinie si aucune autre restriction n'intervient sur $X(x)$.

Considérant maintenant que (I.4) se substitue à (I.2'), $(2q_0 + 1)$ valeurs complexes $\hat{X}(q)$, correspondant en réalité à $(2q_0 + 1)$ composantes réelles indépendantes d'après la relation (I.26), définiront de façon univoque toutes les fonctions $X(x)$ vérifiant (I.4). On obtient ainsi le résultat essentiel suivant (Tab. I.1, ligne 7) : l'espace vectoriel E_{q_0} des fonctions périodiques $X(x)$ réelles de période unité et de spectre borné, satisfaisant donc (I.4), est de dimension finie impaire $(2q_0 + 1)$, correspondant au nombre de degrés de liberté de la fonction $X(x)$.

4.2. Dimension de l'espace vectoriel des fonctions d'interpolation $S(K,x)$

4.2.1. K impair

Cette dimension ne peut en aucun cas être supérieure à K car les fonctions $\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})$, vérifiant la condition de NYQUIST (I.13) d'après l'expression même de leur TF (A2.18), sont toutes éléments de $E_{(K-1)/2}$. La relation d'orthogonalité, établie pour ces fonctions dans l'appendice 2, permet donc de conclure immédiatement : les fonctions $\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})$ forment un ensemble complet, de dimension K , de vecteurs orthogonaux de l'espace $E_{(K-1)/2}$ (Tab. I.1, ligne 8). D'où découlent

les relations des lignes 10 et 11 du Tab. I.1, conséquentes au fait que les valeurs $X(k/K)$ peuvent être considérées, à un coefficient de normalisation près, comme les valeurs des projections de $X(x)$ sur les vecteurs de la base précédente ; l'expression de la ligne 10 exprime en particulier la transformation inverse de celle impliquée à la ligne 9 :

$$X\left(\frac{k}{K}\right) = K \langle X(x), \tilde{S}\left(K, x - \frac{k}{K}\right) \rangle = (-1)^k \int_{-1/2}^{+1/2} \frac{X(x) \sin K\pi x}{\sin\left(x - \frac{k}{K}\right)} dx \quad (I.27)$$

Le couple de relations (I.16) et (I.27) joue alors un rôle tout-à-fait analogue au couple de relations (I.2) et (I.4), définissant le développement en série de FOURIER, et mettant ainsi en correspondance, comme ce dernier, un espace discret ou échantillonné avec un espace continu, et réciproquement. Cette remarque, précisée ultérieurement, vaut d'ailleurs tout aussi bien pour les deux autres situations d'échantillonnage considérées dans le Tab. I.1.

4.2.2. K pair

La question s'avère ici un peu plus délicate que précédemment, les $\tilde{S}\left(K, x - \frac{k}{K}\right)$ ne possédant pas dans ce cas de relation d'orthogonalité telle que (A2.20) ; de plus, comportant $(K + 1)$ composantes non nulles, leurs spectres (A2.21) ne satisfont pas la condition de NYQUIST (I.13). La démonstration se fera ici en deux temps :

a) La dimension de l'espace vectoriel des fonctions $\tilde{S}\left(K, x - \frac{k}{K}\right)$ est inférieure à $K + 1$:

Il suffit de constater qu'il n'y a que K fonctions $\tilde{S}\left(K, x - \frac{k}{K}\right)$ distinctes, pour $k = 0, 1, \dots, K - 1$.

b) Il existe un déterminant d'ordre K , formé à partir des composantes des fonctions $\tilde{S}\left(K, x - \frac{k}{K}\right)$ rapportées à une base orthogonale, qui n'est jamais nul :

En effet, le déterminant D , formé sur les K premières composantes des spectres (A2.21) de $\tilde{S}\left(K, x - \frac{k}{K}\right)$ pour $k = 0, 1, \dots, K - 1$, celles-ci correspondant aux projections sur la base orthogonale (I.25), s'écrit :

$$D = \begin{vmatrix} \frac{1}{2K} & \frac{1}{K} & \frac{1}{K} & \dots & \frac{1}{K} & \dots & \frac{1}{K} \\ \frac{1}{2K} & \frac{S_1}{K} & \frac{S_2}{K} & \dots & \frac{S_\ell}{K} & \dots & \frac{S_{K-1}}{K} \\ \frac{1}{2K} & \frac{S_1^2}{K} & \frac{S_2^2}{K} & \dots & \frac{S_\ell^2}{K} & \dots & \frac{S_{K-1}^2}{K} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{(-1)^k}{2K} & \frac{S_1^k}{K} & \frac{S_2^k}{K} & \dots & \frac{S_\ell^k}{K} & \dots & \frac{S_{K-1}^k}{K} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{1}{2K} & \frac{S_1^{K-1}}{K} & \frac{S_2^{K-1}}{K} & \dots & \frac{S_\ell^{K-1}}{K} & \dots & \frac{S_{K-1}^{K-1}}{K} \end{vmatrix}$$

en posant :

$$S_\ell = -e^{-i\frac{2\pi\ell}{K}}$$

Après utilisation de la multilinéarité des déterminants, D prend immédiatement la forme d'un déterminant de Vandermonde :

$$D = \frac{1}{2(K^k)} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ S_0 & S_1 & S_2 & \dots & S_{K-1} \\ S_0^2 & S_1^2 & S_2^2 & \dots & S_{K-1}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_0^{K-1} & S_1^{K-1} & S_2^{K-1} & \dots & S_{K-1}^{K-1} \end{vmatrix}$$

dont l'expression vaut :

$$D = \frac{1}{2(K^k)} \prod_{\ell < \ell'} (S_\ell - S_{\ell'})$$

Le second membre de cette relation, produit de termes $(S_\ell - S_{\ell'})$ non nuls, puisque $S_\ell \neq S_{\ell'}$, pour $\ell \neq \ell'$, est lui-même différent de zéro :

$$D \neq 0$$

Les K fonctions $\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})$ constituent donc une base non orthogonale d'un espace vectoriel de dimension K .

On constate ainsi que pour K pair la dimension de l'espace des fonctions d'interpolation est supérieure d'une unité à celle $((K - 1)$ d'après le paragraphe I.4.1.) de l'espace des fonctions reconstruites; cette propriété différencie nettement les deux fonctions $\hat{S}(K, x)$ et $\hat{S}(K, x)$.

4.3. Conséquence pour les échantillons de la condition de NYQUIST

Soit une suite de K valeurs numériques arbitraires $\{X_k\}$ pour $k = 0, 1, \dots, K - 1$. On peut se poser la question suivante, en quelque sorte complémentaire de celle de l'échantillonnage : Dans quelle mesure peut-on considérer la suite $\{X_k\}$ comme les échantillons uniformes d'une fonction continue périodique, ces échantillons couvrant intégralement la période, et la reconstruction pouvant s'effectuer sans ambiguïté ?

La relation de reconstruction (I.16) exprime en fait la fonction reconstruite $X(x)$ comme une combinaison linéaire de fonctions d'interpolation $\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})$, chacune de celles-ci intervenant avec le poids $X_k = X(\frac{k}{K})$; la réponse à la question précédente dépendra ainsi encore de la parité de K :

a) K impair

Les $\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})$ vérifiant la condition de NYQUIST, la linéarité de la TF conduit $X(x)$ à la remplir aussi. La suite $\{X_k\}$ n'a donc aucune condition particulière à remplir.

b) K pair

La fonction $X(x)$ qui pour une reconstruction non ambiguë satisfait à la condition de NYQUIST, est la somme de fonctions d'interpolation $\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})$ qui elles n'y satisfont pas dans ce cas. Cette situation "paradoxale" implique que les X_k ne peuvent plus être indépendants, et qu'en conséquence ils obéissent nécessairement à une relation que nous allons déterminer.

Pour cela, exprimons la TF $[X(x)]$ en fonction des valeurs $X_k = X(\frac{k}{K})$ en portant le second membre de (I.16) dans la définition (I.2) :

$$\hat{X}(q) = \int_{-1/2}^{+1/2} \left[\sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) S_{\nu}\left(K, x - \frac{k}{K}\right) \right] e^{-12\pi q x} dx \quad (I.28)$$

et en permutant la somme discrète et l'intégrale :

$$\hat{X}(q) = \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \left[\int_{-1/2}^{+1/2} S_{\nu}\left(K, x - \frac{k}{K}\right) e^{-12\pi q x} dx \right]$$

L'intégrale figurant au second membre est en fait la TF $[S_{\nu}(K, x - \frac{k}{K})]$ (A2.21) et donc :

$$\hat{X}(q) = 0 \quad \text{pour} \quad q \notin \left[-\frac{K}{2}, \frac{K}{2}\right] \quad (I.29)$$

$$\hat{X}(q) = \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) e^{-12\pi \frac{kq}{K}} \quad \text{pour} \quad q \in \left]-\frac{K}{2}, \frac{K}{2}\right[\quad (I.30)$$

$$\hat{X}(q) = \frac{1}{2K} \sum_{k=0}^{K-1} (-1)^k X\left(\frac{k}{K}\right) \quad \text{pour} \quad |q| = \frac{K}{2} \quad (I.31)$$

Mais la condition de NYQUIST s'exprime directement pour l'échantillonnage considéré de $X(x)$ par :

$$\hat{X}(q) = 0 \quad \text{pour} \quad q \notin \left]-\frac{K}{2}, \frac{K}{2}\right[\quad (I.32)$$

et donc impose pour les $\{X_k\}$ la seule condition nécessaire et suffisante :

$$\sum_{k=0}^{K-1} (-1)^k X_k = 0 \quad \text{pour } K \text{ pair} \quad (I.33)$$

4.4. Conservation du produit scalaire, dans le cas d'une base de fonctions d'interpolation non orthogonale (K pair)

Alors que les relations des lignes 10 et 11 du Tab. I.1 découlaient immédiatement, pour des fonctions non périodiques et dans le cas de fonctions périodiques pour K impair, de l'orthogonalité des bases de fonctions $\text{sinc}(Kx - k)$ et $S_{\nu}(K, x - \frac{k}{K})$, il peut être légitime de penser que de telles relations ne seront pas nécessairement vérifiées pour des fonctions périodiques avec K pair, les fonctions $S_{\nu}(K, x - \frac{k}{K})$ ne pouvant plus alors être considérées comme orthogonales. Nous allons voir qu'en réalité, la condition de NYQUIST étant vérifiée (ce que l'on supposera toujours plus ou moins explicitement, dans les applications pratiques, afin que les calculs menés puissent avoir un sens), de telles relations existent et apparaissent tout-à-fait semblables à celles déjà obtenues.

Nous constaterons alors que des contraintes du type (I.33) doivent intervenir explicitement pour qu'il en soit ainsi.

En effet, soit les suites de K échantillons (K pair) $\{X_k\}$ et $\{Y_k\}$ des fonctions périodiques $X(x)$ et $Y(x)$, respectivement. La condition de NYQUIST étant satisfaite pour ces deux fonctions :

$$\begin{cases} X(x) = \sum_{k=0}^{K-1} X_k S(K, x - \frac{k}{K}) & ; & Y(x) = \sum_{k=0}^{K-1} Y_k S(K, x - \frac{k}{K}) \end{cases} \quad (I.34)$$

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^{K-1} (-1)^k X_k = 0 & ; & \sum_{k=0}^{K-1} (-1)^k Y_k = 0 \end{cases} \quad (I.35)$$

Formant le produit membre à membre des deux relations (I.35) précédentes :

$$\sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{K-1} (-1)^{k-\ell} X_k Y_\ell = 0 \quad (I.36)$$

et d'autre part le produit scalaire des deux fonctions $X(x)$ et $Y(x)$:

$$\int_{-1/2}^{+1/2} X(x) Y(x) dx = \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{K-1} X_k Y_\ell \int_{-1/2}^{+1/2} S(K, x - \frac{k}{K}) S(K, x - \frac{\ell}{K}) dx$$

Cette expression, une fois développée avec (A2.22), prend la forme :

$$\int_{-1/2}^{+1/2} X(x) Y(x) dx = -\frac{1}{2K^2} \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{K-1} (-1)^{k-\ell} X_k Y_\ell + \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X_k Y_k \quad (I.37)$$

D'après (I.36), la première somme du deuxième membre de (I.37), due au terme d'interférence de (A2.22), est nulle, ce qui entraîne donc, à l'instar des cas précédents, mais par un processus moins évident :

$$\int_{-1/2}^{+1/2} X(x) Y(x) dx = \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X_k Y_k \quad (I.38)$$

Pour $Y(x) = S(K, x - \frac{k}{K})$, la formule d'échantillonnage (Tab. I.1, ligne 10) devient alors une conséquence immédiate de la relation (I.38) :

$$X(\frac{k}{K}) = (-1)^k \int_{-1/2}^{+1/2} \frac{X(x) \sin K\pi x}{\operatorname{tg} \pi(x - \frac{k}{K})} dx \quad (I.39)$$

En effet, il suffit que les échantillons de $X(x)$ vérifient une relation du type (I.33) pour que, bien que ce ne soit aucunement le cas des échantillons des fonctions $S(K, x - \frac{k}{K})$, la relation (I.36) soit remplie.

4.5. L'opération d'échantillonnage E(K)

4.5.1. Linéarité

Définissons E(K) comme l'opération d'échantillonnage consistant à prélever K échantillons, sur les fonctions continues X(x) ou Y(x), pour K valeurs x_k ($k \in [0, K-1]$) de la variable réelle x :

$$E(K)[X(x)] = \{X_k = X(x_k)\} \quad ; \quad k \in [0, K-1] \quad (I.40)$$

Cet opérateur E(K), qui applique l'ensemble des fonctions continues d'une variable réelle dans l'ensemble des suites de K éléments, est linéaire :

$$E(K)[X(x) + \lambda Y(x)] = E(K)[X(x)] + \lambda E(K)[Y(x)] \quad \text{pour tout } \lambda \quad (I.41)$$

car :

$$\{X_k + \lambda Y_k\} = \{X_k\} + \lambda \{Y_k\} \quad \text{pour tout } k \in [0, K-1]$$

4.5.2. Inversibilité

Supposons maintenant, de plus, que l'échantillonnage E(K) s'effectue uniformément :

$$x_k = \frac{k}{K} \quad \text{pour } k \in [0, K-1]$$

Lorsque la transformation E(K) porte sur un élément X(x) de l'espace vectoriel de dimension K (respectivement (K - 1) si K pair) des fonctions périodiques réelles de période unité et de spectre à support borné, la condition de NYQUIST étant satisfaite, E(K) peut s'inverser ; la relation de reconstruction (I.16) définit alors, de façon unique, la transformation $E^{-1}(K)$, qui associe ainsi la fonction continue X(x) à la suite discrète $\{X_k\}$ (Fig. I.2, branche (1)).

4.5.3. Ré-échantillonnage et échantillonnage non uniforme

Le ré-échantillonnage est l'opération linéaire R(K) qui, partant de la suite de K échantillons uniformes $\{X(\frac{k}{K})\}$, détermine la suite de K échantillons $\{X(x_k)\}$ en général non uniformes, cette suite

$\{X(x_k)\}$ devant toujours permettre théoriquement la reconstruction univoque de la fonction $X(x)$; (I.23) définit par exemple une telle opération dans le cas très particulier de la translation, la suite $\{X(x_k)\}$ correspondant alors à un échantillonnage uniforme translaté par rapport à l'échantillonnage initial.

Dans le cas général, un système de K équations, immédiatement déduit de (I.16), peut résoudre la question :

$$X(x_k) = \sum_{\ell=0}^{K-1} X(\frac{\ell}{K}) S(K, x_k - \frac{\ell}{K}) ; k \in [0, K-1] \quad (I.42)$$

mais du fait de l'unicité imposée à la reconstruction de $X(x)$, la suite des abscisses d'échantillonnage $\{x_k\}$ ne peut être arbitraire, le système de K équations linéaires (I.42) résolu en $x(\frac{\ell}{K})$ ($\ell \in [0, K-1]$) devant conduire à une unique solution. Le déterminant Δ d'ordre K , formé sur la matrice des $S(K, x_k - \frac{\ell}{K})$, doit par conséquent posséder une valeur non nulle, fournissant ainsi une condition suffisante pour que la suite $\{x_k\}$ convienne :

$$\Delta(K, \{x_k\}) = \begin{vmatrix} S(K, x_0) & \dots & S(K, x_0 - \frac{\ell}{K}) & \dots & S(K, x_0 - \frac{K-1}{K}) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ S(K, x_K) & \dots & S(K, x_K - \frac{\ell}{K}) & \dots & S(K, x_K - \frac{K-1}{K}) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ S(K, x_{K-1}) & \dots & S(K, x_{K-1} - \frac{\ell}{K}) & \dots & S(K, x_{K-1} - \frac{K-1}{K}) \end{vmatrix} \neq 0 \quad (I.43)$$

Supposant (I.43) satisfaite, on doit se poser la question de la reconstruction de $X(x)$ basée sur les échantillons $\{X(x_k)\}$; $U(k, \ell)$ représentant les éléments de la matrice inverse des $S(K, x_k - \frac{\ell}{K})$ (qui existe nécessairement, celle-ci étant non singulière de par (I.43)), la résolution de (I.42) par rapport à $X(\frac{\ell}{K})$ donne :

$$X(\frac{\ell}{K}) = \sum_{k=0}^{K-1} X(x_k) U(k, \ell) \quad (I.44)$$

résultat qui, porté dans (I.16), conduit à :

$$X(x) = \sum_{\ell=0}^{K-1} \left[\sum_{k=0}^{K-1} X(x_k) U(k, \ell) \right] S(K, x - \frac{\ell}{K})$$

Puis, par permutation des sommations dans cette relation :

$$X(x) = \sum_{k=0}^{K-1} X(x_k) \sum_{\ell=0}^{K-1} U(k, \ell) S(K, x - \frac{\ell}{K})$$

expression dans laquelle la seconde somme définit un nouvel ensemble de K fonctions de reconstruction V déduites des fonctions S par une transformation linéaire liée au choix des points d'échantillonnage $\{x_k\}$:

$$V(K, x, k, \{x_k\}) = \sum_{\ell=0}^{K-1} U(k, \ell) S(K, x - \frac{\ell}{K}) \quad (I.45)$$

La relation de reconstruction conserve donc toujours ainsi une forme linéaire :

$$X(x) = \sum_{k=0}^{K-1} X(x_k) V(K, x, k, \{x_k\}) \quad (I.46)$$

On pourra aussi noter que le choix des valeurs $\{x_k\}$ ne dépend (cela s'avère remarquable) que de la seule possibilité de satisfaire la condition (I.43) portant uniquement sur les fonctions de reconstruction S, et en aucun cas de la forme particulière de la fonction X(x).

5. TRANSFORMATION DE FOURIER CONTINUE, ECHANTILLONNAGE ET TRANSFORMATION DE FOURIER

DISCRETE (TFD)

5.1. Intervention de la TFD

Bien que la TFD ne soit habituellement envisagée, lors des calculs radiocristallographiques, qu'en tant que simple moyen de calcul et d'approximation numérique des relations (I.2) et (I.2'), cette transformation peut également, d'une part être définie, étudiée (Appendice 1) et utilisée (Chapitre II, III) indépendamment de toute signification

physique ou mathématique, et d'autre part s'introduire comme lien naturellement complémentaire des opérations TF continue et échantillonnage $E(K)$, entre l'espace direct discrétisé et l'espace réciproque. Cette intervention de la TFD se réalise alors sans approximation supplémentaire d'aucune sorte.

Comme il a été signalé au paragraphe 4.2.1., les transformations $E(K)$ et TF continue jouent, dans une certaine mesure, un rôle parallèle, en ce qu'elles mettent en correspondance fonctions continues périodiques à largeur de bande limitée et suites discrètes finies de K valeurs, ces valeurs numériques appartenant dans le premier cas à l'espace direct et dans le second à l'espace réciproque (Fig. I.2., branches (1) et (2)). On peut dans ces conditions légitimement souhaiter introduire la transformation permettant une correspondance directe entre les deux types de suites $\{X(\frac{k}{K})\}$ et $\{\hat{X}(q)\}$ précédentes, qui s'écrit d'après la Fig. I.2. :

$$\begin{cases} \{\hat{X}(q)\} = \text{TF} \circ E^{-1}(K) \{X(\frac{k}{K})\} \\ \{X(\frac{k}{K})\} = E(K) \circ \text{TF}^{-1} \{\hat{X}(q)\} \end{cases} \quad (\text{I.47})$$

"o" désignant le produit de composition des applications. La transformation linéaire ainsi définie par la première relation (I.47) est en fait, à un coefficient numérique multiplicatif près, la TFD(K) (A1.1), la deuxième relation correspondant alors évidemment à la $\text{TFD}^{-1}(K)$ (A1.3).

En effet, explicitons par exemple la première relation (I.47), i.e. portons (I.16) dans la définition (I.2) :

$$\hat{X}(q) = \int_{-1/2}^{+1/2} \left[\sum_{k=0}^{K-1} X(\frac{k}{K}) S(K, x - \frac{k}{K}) \right] e^{-i2\pi qx} dx$$

En permutant sommation discrète et continue, cette expression devient :

$$\hat{X}(q) = \sum_{k=0}^{K-1} X(\frac{k}{K}) \int_{-1/2}^{+1/2} S(K, x - \frac{k}{K}) e^{-i2\pi qx} dx$$

où l'intégrale représente la TF de la fonction $S(K, x - \frac{k}{K})$ dont l'expression, (A2.18) ou (A2.21), diffère suivant la parité de K , conduisant ainsi à deux expressions possibles de $\hat{X}(q)$:

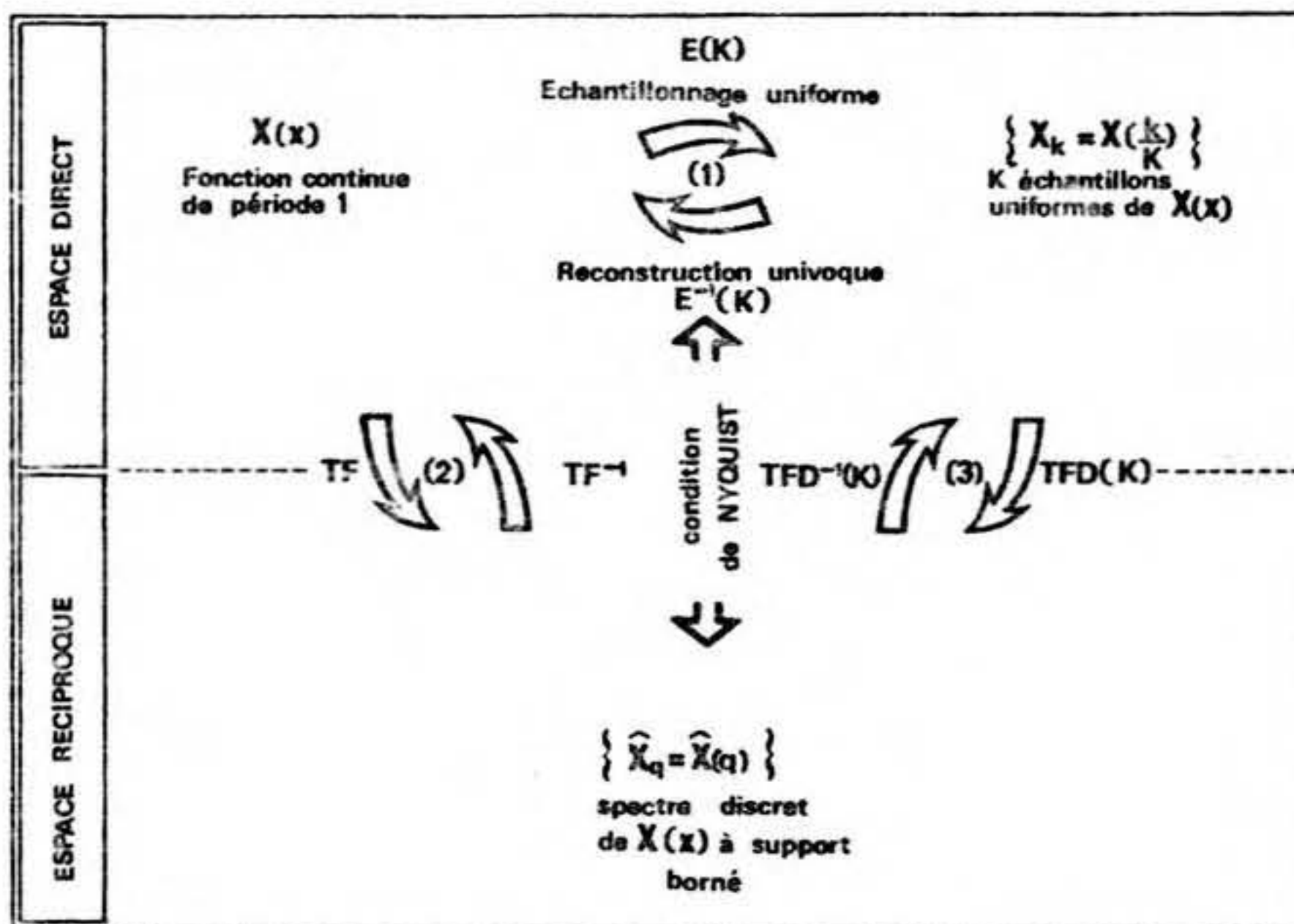


Fig. I.2. Relations existant entre les trois transformations linéaires TF , $E(K)$ et $TFD(K)$ lorsque la condition de NYQUIST se vérifie.

$$\left\{ \begin{array}{l} K \text{ impair} \\ K \text{ pair} \end{array} \right. \hat{X}(q) = \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \exp\left(-i\frac{2\pi qk}{K}\right) ; |q| < \frac{K+1}{2}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{X}(q) = \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \exp\left(-i\frac{2\pi qk}{K}\right) ; |q| < \frac{K}{2} \\ \hat{X}(q) = \frac{1}{2K} \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) (-1)^k ; q = \pm \frac{K}{2} \end{array} \right.$$

La condition de NYQUIST intervenant une nouvelle fois sous la forme (I.33), et pour $X_k \equiv X\left(\frac{k}{K}\right)$, $\hat{X}_q \equiv \hat{X}(q)$, on peut écrire pour toute valeur entière de K :

$$\hat{X}_q = \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X_k \exp\left(-i\frac{2\pi kq}{K}\right) \quad q \text{ étant pris modulo } K$$

et donc d'après (A1.1) et (A1.3) :

$$\left\{ \begin{array}{l} TF \circ E^{-1}(K) \equiv \frac{1}{K} TFD(K) \\ E(K) \circ TF^{-1} \equiv K TFD^{-1}(K) \end{array} \right. \quad (I.48)$$

Le schéma triangulaire (Fig. I.2.) des relations entre $\{X_k\}$, $X(x)$ et $\{\hat{X}_q\}$, amorcé avec les branches (1) et (2), peut dès lors se refermer avec la branche (3) attribuée à la TFD(K).

5.2. Substitution des calculs discrets aux calculs continus

Une conséquence immédiate, et essentielle, du résultat établi au paragraphe précédent est que la TFD peut purement et simplement, en toute rigueur, remplacer la TF continue dans le développement des calculs radiocristallographiques liés aux milieux périodiques, la seule restriction consistant à user, ce qui s'avère aisé, d'un échantillonnage respectant la condition de NYQUIST.

La TFD établit dans ce cas un pont direct, très particulièrement adapté aux calculs numériques (chapitre III), entre les deux suites d'échantillons $\{X(k/K)\}$ et $\{\hat{X}(q)\}$, les deux formes (directe et réciproque) de base que revêt l'information discrète concernant la fonction périodique $X(x)$. Des calculs arithmétiques portant uniquement sur un nombre limité de valeurs discrètes, relatives tant à l'espace réciproque qu'à l'espace direct, se substitueront alors à des calculs portant en principe sur des fonctions continues d'une variable réelle, ainsi qu'aux approximations qui leurs sont liées.

Cette propriété courante et générale des développements en séries de fonctions orthogonales (ANGOT, 1957), prend ici toute sa valeur avec la TFD, très apparentée à la TF continue impliquée intrinsèquement dans les calculs radiocristallographiques, reproduisant ainsi, de par cette similitude, l'essentiel des propriétés particulièrement attrayantes de celle-ci :

- Les opérations linéaires telles que convolution, corrélation, dérivation, intégration, translation, etc..., peuvent être considérées comme des produits de convolution (au sens de la théorie des distributions) relevant donc du théorème de BOREL discret (A1.8).

- Les sommes de termes quadratiques (ou même de degrés différents), quant à elles, s'interprètent comme des produits scalaires aisément exprimables aussi bien dans l'espace direct échantillonné, par (I.38); que dans l'espace réciproque, par le théorème de PARSEVAL (A1.12).

Considérons, par exemple, le problème consistant à déterminer les K échantillons $\left\{ \frac{dX}{dx} \Big|_{x = k/K} \right\}$ de $\frac{dX}{dx}$ connaissant les K échantillons $\{X(k/K)\}$ de $X(x)$. Deux processus théoriquement équivalents conduisent au résultat recherché :

a) La dérivation membre à membre de (I.16) donne :

$$\frac{dX}{dx} = \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \frac{d}{dx} S\left(K, x - \frac{k}{K}\right)$$

et explicitement suivant la parité de K :

$$\begin{cases} K \text{ impair} \\ \frac{dX}{dx} = \frac{\pi}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \left[K \cos K\pi \left(x - \frac{k}{K}\right) \sin \pi \left(x - \frac{k}{K}\right) - \sin K\pi \left(x - \frac{k}{K}\right) \cos \pi \left(x - \frac{k}{K}\right) \right] / \sin^2 \pi \left(x - \frac{k}{K}\right) \quad (I.49) \end{cases}$$

$$\begin{cases} K \text{ pair} \\ \frac{dX}{dx} = \frac{\pi}{K} \sum_{k=0}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \left[K \cos K\pi \left(x - \frac{k}{K}\right) \operatorname{tg} \pi \left(x - \frac{k}{K}\right) - \sin K\pi \left(x - \frac{k}{K}\right) (1 + \operatorname{tg}^2 \pi \left(x - \frac{k}{K}\right)) \right] / \operatorname{tg}^2 \pi \left(x - \frac{k}{K}\right) \quad (I.49') \end{cases}$$

Ces expressions (I.49) et (I.49') évaluées au point $x = \frac{\ell}{K}$ se simplifient considérablement :

$$\begin{cases} K \text{ impair} & \left. \frac{dX}{dx} \right|_{x=\ell/K} = \pi \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq \ell}}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \cdot (-1)^{\ell-k} / \sin \frac{\pi(\ell-k)}{K} \\ K \text{ pair} & \left. \frac{dX}{dx} \right|_{x=\ell/K} = \pi \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq \ell}}^{K-1} X\left(\frac{k}{K}\right) \cdot (-1)^{\ell-k} / \operatorname{tg} \frac{\pi(\ell-k)}{K} \end{cases} \quad (\text{I.50})$$

Les relations (I.50), qui fournissent ainsi une réponse à la question posée plus haut, permettent en outre deux constatations :

- La valeur de $\frac{dX}{dx}$ en un point d'abscisse $x = \frac{\ell}{K}$ ne dépend pas explicitement de l'amplitude de $X(x)$ en ce même point. Ce fait "paradoxal", mais réel pour K impair, ne constitue au contraire pour K pair qu'une apparence, les $\{X(k/K)\}$ étant linéairement dépendants par la relation (I.33).

- Définissant les suites cycliques de K termes $\{V_k\}$ et $\{W_k\}$ par :

$$\begin{cases} V_k = 0 & k = 0 & ; & V_k = \pi \cdot (-1)^k / \sin(\pi k/K) & k \in]0, K-1] \\ W_k = 0 & k = 0 & ; & W_k = \pi \cdot (-1)^k / \operatorname{tg}(\pi k/K) & k \in]0, K-1] \end{cases} \quad (\text{I.52})$$

les expressions (I.50) prennent alors les formes symboliques :

$$\begin{cases} K \text{ impair} & \left\{ \left. \frac{dX}{dx} \right|_{x=\ell/K} \right\} = \{X_k\} * \{V_k\} \\ K \text{ pair} & \left\{ \left. \frac{dX}{dx} \right|_{x=\ell/K} \right\} = \{X_k\} * \{W_k\} \end{cases} \quad (\text{I.52})$$

de convolutions discrètes cycliques, suggérant ainsi une "autre" méthode de calcul dans l'espace réciproque par la TFD.

b) Pour :

$$\hat{X}(u) = \operatorname{TF}[X(x)]$$

une propriété classique de la TF continue (CURIEN & TOURNARIE, p. 15), pour la dérivation, donne :

$$\frac{dX}{dx} = TF^{-1}[i2\pi u \hat{X}(u)]$$

On constate ainsi qu'un spectre à support borné discret pour $X(x)$ implique une propriété identique pour la fonction $\frac{dX}{dx}$ et donc d'après la deuxième relation (I.48) :

$$\left\{ \frac{dX}{dx} \right\}_{x=k/K} = K \text{TFD}^{-1}(K) \{i2\pi q \hat{X}(q)\} \quad (\text{I.53})$$

Or les $\text{TFD}(K)$ des suites $\{V_k\}$ et $\{W_k\}$ ont pour expressions explicites :

K impair (I.54)

$$\hat{V}_q = i2\pi q \quad q \in [0, (K-1)/2] ; \hat{V}_q = i2\pi(q-K) \quad q \in [(K+1)/2, K-1]$$

K pair (I.54')

$$\hat{W}_q = i2\pi q \quad q \in [0, K/2[; \hat{W}_q = 0 \quad q = K/2 ; \hat{W}_q = i2\pi(q-K) \quad q \in]K/2, K-1]$$

Puisque d'après la première relation (I.48) :

$$K\{\hat{X}(q)\} = \text{TFD}(K)\{X(k/K)\}$$

on reconnaît dans (I.53) le calcul de (I.49) et (I.49') par application du théorème de BOREL discret (A1.8).

CALCUL RAPIDE DU PRODUIT DE CONVOLUTION DISCRET

C H A P I T R E I I

Pour désigner le produit de composition discret, nous emploierons la terminologie, courante et sans ambiguïté, de convolution discrète.

L'application du théorème de BOREL discret (A1.8) au calcul numérique de la convolution discrète, permet de profiter de la puissance des algorithmes FFT en ce qu'ils provoquent un gain de temps de calcul très appréciable, malgré les trois TFD en général ainsi nécessitées. Réalisée pour un support de taille K , cette convolution rapide nécessite approximativement $(6K\log_2 K + K)$ opérations complexes par passage dans l'espace réciproque, tandis qu'elle en réclamerait de l'ordre de K^2 pour son développement dans l'espace direct ; or $K^2/(6K\log_2 K + K) \approx 3$ pour une valeur, encore relativement faible en pratique, de $K = 128$, et ce rapport croît très rapidement avec K , divisant d'autant la masse des calculs effectués.

Encore faut-il, dans le cas particulier de l'évaluation de la convolution discrète aperiodique, prendre quelques précautions quant à la disposition des calculs, "forçant" ainsi la convolution cyclique, impliquée par l'emploi de la TFD, à fournir les résultats de la convolution aperiodique ; cette question fait précisément l'objet de l'étude qui suit.

1. CONVOLUTION DISCRETE APERIODIQUE

Les propriétés développées dans ce paragraphe pour le cas d'une seule dimension, par souci de clarté et commodité, peuvent s'étendre immédiatement à un nombre de dimensions supérieur.

Soit les suites non périodiques $\{X_k\}$, $\{Y_k\}$, ainsi que les entiers KX_1 , KX_2 , KY_1 et KY_2 tels que :

$$\begin{aligned} X_k &= 0 \text{ pour } k \notin [KX_1, KX_2] ; 0 \in [KX_1, KX_2] \\ Y_k &= 0 \text{ pour } k \notin [KY_1, KY_2] ; 0 \in [KY_1, KY_2] \end{aligned} \quad (\text{II.1})$$

Les relations précédentes définissent pour les deux suites $\{X_k\}$ et $\{Y_k\}$ les dimensions de leurs supports, respectivement, ΔKX et ΔKY :

$$\Delta KX = KX_2 - KX_1 + 1 ; \Delta KY = KY_2 - KY_1 + 1 \quad (\text{II.2})$$

La convolution apériodique (non cyclique) des suites $\{X_k\}$ et $\{Y_k\}$ est la suite apériodique $\{Z_k\} = \{X_k\} \otimes \{Y_k\} = \{Y_k\} \otimes \{X_k\}$ définie, lorsqu'elle existe, par la somme :

$$Z_k = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} X_h Y_{k-h} \quad (\text{II.3})$$

L'intervalle de sommation peut se réduire en fonction de la valeur effectivement prise par k ; le produit $X_h Y_{k-h}$ contribue en général à la valeur totale de la somme dans la mesure où il ne possède pas une valeur systématiquement nulle, c'est-à-dire pour h solution du système d'inéquations :

$$\begin{cases} KX_1 \leq h \leq KX_2 \\ k - KY_2 \leq h \leq k - KY_1 \end{cases} \quad (\text{II.4})$$

Poser $\Delta KY \leq \Delta KX$ ne diminue en rien la généralité du raisonnement, du fait de la commutativité de la convolution, et donne :

$$KX_1 + KY_1 \leq KX_1 + KY_2 \leq KX_2 + KY_1 \leq KX_2 + KY_2 \quad (\text{II.5})$$

de plus, puisque :

$$\begin{aligned} KX_1 + KY_2 \leq k &\implies KX_1 \leq k - KY_2 \\ KX_2 + KY_1 \leq k &\implies KX_2 \leq k - KY_1 \end{aligned}$$

le système d'inéquations (II.4) permet d'attribuer à l'expression générale (II.3) une forme spécifique à chacun des cinq intervalles de variation de k , définis par (II.5) :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{a)} & k \in]-\infty, KX_1 + KY_1[\quad \underline{Z}_k = 0 \\ \text{b)} & k \in [KX_1 + KY_1, KX_1 + KY_2] \quad \underline{Z}_k = \sum_{h=KX_1}^{k-KY_1} \underline{X}_h \underline{Y}_{k-h} \\ \text{c)} & k \in [KX_1 + KY_2, KX_2 + KY_1] \quad \underline{Z}_k = \sum_{h=k-KY_2}^{k-KY_1} \underline{X}_h \underline{Y}_{k-h} \\ \text{d)} & k \in [KX_2 + KY_1, KX_2 + KY_2] \quad \underline{Z}_k = \sum_{h=k-KY_2}^{KX_2} \underline{X}_h \underline{Y}_{k-h} \\ \text{e)} & k \in [KX_2 + KY_2, +\infty[\quad \underline{Z}_k = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.6})$$

Ce groupe de relations (II.6) appelle plusieurs constatations :

- Posant :

$$KZ_1 = KX_1 + KY_1 ; KZ_2 = KX_2 + KY_2 \quad (\text{II.7})$$

le support de $\{\underline{Z}_k\}$ est tel que :

$$\underline{Z}_k = 0 \text{ pour } k \notin [KZ_1, KZ_2] ; 0 \in [KZ_1, KZ_2] \quad (\text{II.8})$$

- La dimension ΔKZ du support de $\{\underline{Z}_k\}$ s'exprime uniquement en fonction des seules dimensions des supports de $\{\underline{X}_k\}$ et $\{\underline{Y}_k\}$:

$$\Delta KZ = KZ_2 - KZ_1 + 1 = \Delta KX + \Delta KY - 1 \quad (\text{II.9})$$

- Le calcul effectif des valeurs \underline{Z}_k , pour k appartenant à un intervalle de dimension réduite, n'implique pas nécessairement la connaissance exhaustive des valeurs de la suite $\{\underline{X}_k\}$; cette propriété, intéressante dans la pratique, permet de calculer la convolution discrète "par morceau" lorsque la taille du support de $\{\underline{X}_k\}$ est importante, voire illimitée (VERNET, DELEPINE & CONSTANTIN, 1970, p. 10).

2. COMPARAISON AVEC LA CONVOLUTION DISCRETE CYCLIQUE

En supposant toujours $\Delta KY \leq \Delta KX$, soit les suites périodiques $\{\underline{X}_k\}$ et $\{\underline{Y}_k\}$, de période $K \geq \Delta KX$, telles que :

$$\begin{cases} X_k = \underline{X}_k & \text{pour } k \in [0, KX_2] \\ X_k = 0 & \text{pour } k \in]KX_2, K + KX_1[\\ X_k = \underline{X}_{k-K} & \text{pour } k \in [K + KX_1, K] \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

et de même :

$$\begin{cases} Y_k = \underline{Y}_k & \text{pour } k \in [0, KY_2] \\ Y_k = 0 & \text{pour } k \in]KY_2, K + KY_1[\\ Y_k = \underline{Y}_{k-K} & \text{pour } k \in [K + KY_1, K] \end{cases} \quad (\text{II.11})$$

Les définitions adoptées ici pour $\{X_k\}$ et $\{Y_k\}$ conduisent, comme on pourra le constater ultérieurement, à confondre sur une partie de leurs supports les résultats des convolutions apériodique et cyclique.

Soit encore la suite périodique $\{Z_k\}$ de même période K , résultant de la convolution cyclique des suites $\{X_k\}$ et $\{Y_k\}$:

$$Z_k = \{X_k\} * \{Y_k\} = \sum_{h=0}^{K-1} X_h Y_{k-h} \quad (\text{II.12})$$

Dans quelle mesure peut-on substituer le calcul des termes de $\{Z_k\}$ au calcul de ceux de $\{Z_k\}$ dans l'intervalle $[KX_1, KX_2]$?

En segmentant la somme définissant la convolution cyclique précédente :

$$Z_k = \sum_{h=0}^{KX_2} X_h Y_{k-h} + \sum_{h=KX_2+1}^{K+KX_1-1} X_h Y_{k-h} + \sum_{h=K+KX_1}^{K-1} X_h Y_{k-h}$$

La seconde somme reste toujours nulle par définition même de $\{X_k\}$; la périodicité K des suites $\{X_k\}$ et $\{Y_k\}$ autorise la modification des bornes de la troisième somme :

$$Z_h = \sum_{h=0}^{KX_2} X_h Y_{k-h} + \sum_{h=KX_1}^{-1} X_h Y_{k-h}$$

Prenant en compte à nouveau (II.10) :

$$Z_k = \sum_{h=KX_1}^{KX_2} X_h Y_{k-h} \quad (\text{II.13})$$

De plus, la définition (II.11) de $\{Y_k\}$ donne :

$$(k - h) \in [KY_2 - K + 1, K + KY_1 - 1] \Rightarrow \underline{Y}_{k-h} = Y_{k-h}$$

et d'après les bornes de sommation sur h dans la somme (II.13) :

$$k \in [KY_2 - K + 1 + KX_2, K + KY_1 - 1 + KX_1] \Rightarrow \underline{Y}_{k-h} = Y_{k-h} \text{ pour } h \in [KX_1, KX_2]$$

d'où finalement, considérant (II.7), les valeurs de k pour lesquelles les suites $\{\underline{Z}_k\}$ et $\{Z_k\}$ peuvent se confondre :

$$\underline{Z}_k = Z_k \text{ pour } k \in [KZ_2 - K + 1, KZ_1 + K - 1] \quad (\text{II.14})$$

Soit Δk le nombre de telles valeurs de Z_k :

$$\Delta k = (KZ_1 + K - 1) - (KZ_2 - K + 1) + 1$$

donc d'après (II.9) :

$$\Delta k = 2K - \Delta KZ \quad (\text{II.15})$$

Cette relation, importante dans la pratique, signifie que Δ_k est égal, à l'unité près, au nombre total de termes systématiquement nuls, pour les deux suites $\{X_k\}$ et $\{Y_k\}$, dans l'intervalle d'une période K . Précisons les conditions pour lesquelles ces valeurs de Z_k appartiennent au support de $\{\underline{Z}_k\}$, c'est-à-dire d'après (II.8) :

$$KZ_1 \leq KZ_2 - K + 1 \leq KZ_1 + K - 1 \leq KZ_2 \quad (\text{II.16})$$

La seconde inégalité se vérifie toujours par hypothèses :

$$\begin{cases} \Delta KX \leq K \\ \Delta KY \leq KX \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Delta KX + \Delta KY \leq 2K \\ \text{et (II.9)} \end{cases} \Rightarrow KZ_2 - K + 1 \leq KZ_1 + K - 1$$

Quant aux première et dernière inégalités de (II.16), elles équivalent à la seule inégalité :

$$K \leq \Delta KZ \quad (\text{II.17})$$

Ceci conduit à distinguer deux cas :

a) $K \in [1, \Delta KZ]$

Parmi les K termes calculés de Z_k , les $\Delta k = (2K - \Delta KZ)$ valeurs sélectionnées par (II.14) sont toutes des valeurs utiles de Z_k , c'est-à-dire non systématiquement nulles. Par ailleurs, le rendement $\eta = (\text{nombre de valeurs utiles})/(\text{nombre de valeurs calculées})$ se détériore rapidement pour K inférieur à ΔKZ (Fig. II.1.).

Cas particuliers fréquents :

$$\begin{aligned} \bullet \quad K &= \Delta KX ; \Delta k = \Delta KX - \Delta KY + 1 \\ Z_{-k} &= Z_k \text{ pour } k \in [KX_1 + KY_2, KX_2 + KY_1] \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

$$\begin{aligned} \bullet \quad K &= \Delta KZ ; \Delta k = \Delta KZ \\ Z_{-k} &= Z_k \text{ pour } k \in [KZ_1, KZ_2] \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

Dans ce dernier cas, toutes les valeurs souhaitables de Z_k sont calculées avec un rendement optimal de 1 car $\Delta k = K$ (Fig. II.1.).

b) $K \in [\Delta KZ, +\infty[$

Il n'y a, sous cette condition, que ΔKZ valeurs utiles de Z_k (toutes celles recherchées...) parmi les Δk définies par (II.14). La relation (II.19) doit alors se substituer à (II.14). Contrairement au cas a) précédent, la sensibilité du rendement η à la valeur choisie pour K , est faible, η décroissant lentement avec K (Fig. II.1.).

Pour conclure ce chapitre, citons en exemple l'application de l'étude précédente au cas d'un programme de correction d'erreur systématique basé sur l'évaluation d'une moyenne mobile dans l'espace réciproque. Ce programme, après que nous ayons remarqué qu'il s'agissait en fait de réaliser une convolution discrète aperiodique, a bénéficié d'une réduction du temps de ce calcul dans un rapport de plus de 10, comparativement au simple usage de la définition (II.3) programmé, il y a quelques années, dans la version précédente.

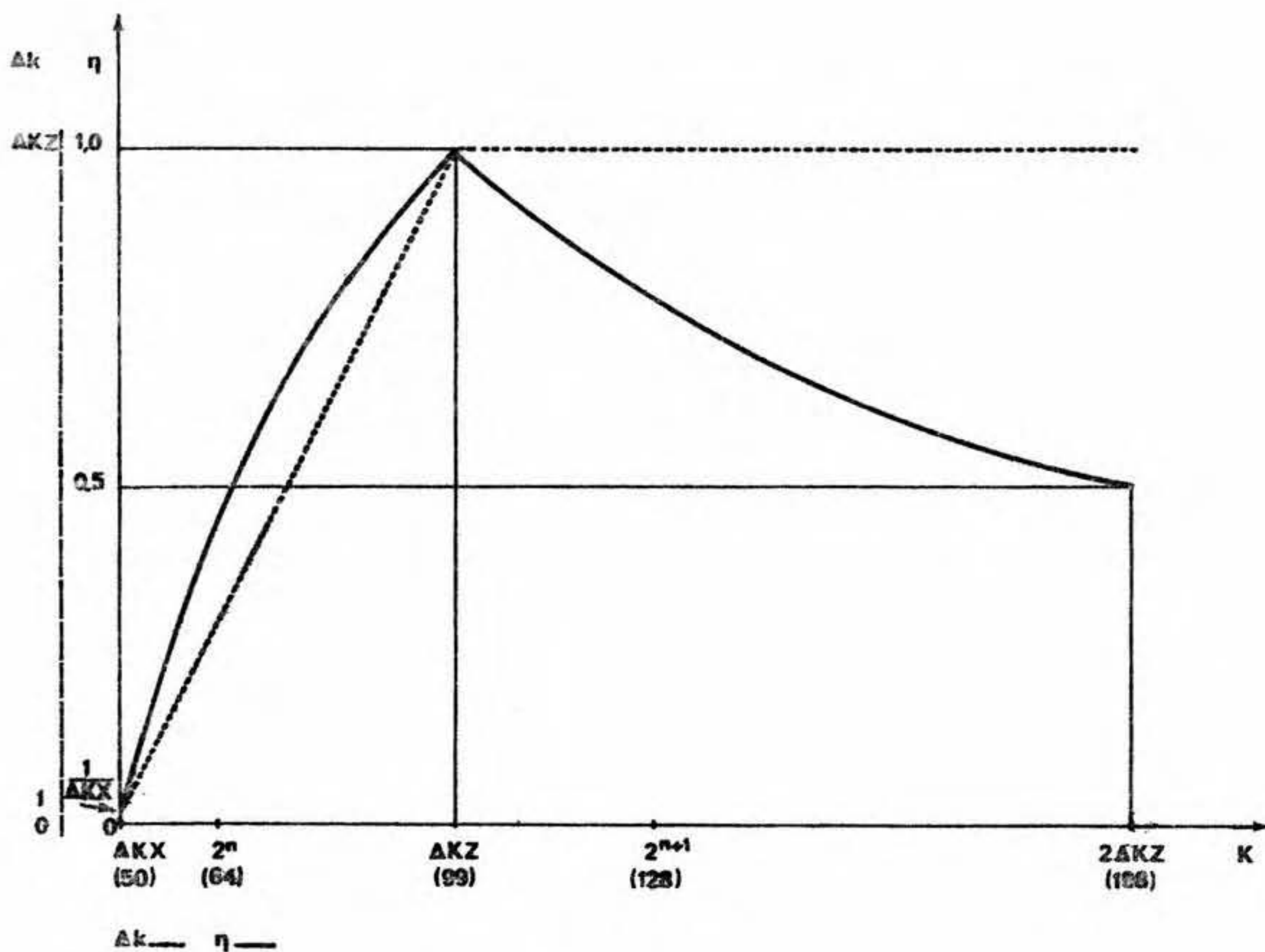


Fig. II.1. Variation du nombre de termes utiles Δk et du rendement η , avec le choix de K , dans le calcul numérique du produit de convolution aperiodique. Cette figure représente un cas fréquent en pratique : $\Delta KX = \Delta KY \Rightarrow \Delta KZ = 2\Delta KX - 1$.

REDUCTION DE MOITIE DU VOLUME MEMOIRE ET DE LA DUREE DE
CALCUL DANS L'USAGE DES ALGORITHMES DE TRANSFORMATION DE
FOURIER RAPIDE (FFT)

C H A P I T R E I I I

1. INTRODUCTION

Les calculs numériques radiocristallographiques requièrent généralement un stockage mémoire en ordinateur et un temps d'unité centrale notables, en particulier la transformation de FOURIER conduite par les méthodes conventionnelles. Le nombre de données à traiter croissant en fonction de la complexité de la structure à étudier, il devient alors crucial de se poser la question de l'optimisation des calculs, notamment lors de l'étude de la structure tridimensionnelle des macromolécules.

L'usage des algorithmes de transformation de FOURIER rapide ("Fast FOURIER Transform" - FFT) (COOLEY & TUKEY, 1965) dans leur forme initiale fait déjà avancer de façon décisive le problème du calcul de la Transformation de FOURIER Discrète (TFD), auquel est toujours conduit le cristallographe qui désire effectuer une transformation de FOURIER continue. En effet, K étant le nombre de données, une réduction du temps de calcul proportionnelle à $(\log_2 K/K)$ par rapport à l'utilisation directe de la définition est obtenue, et cela quelle que soit la dimension de l'espace considéré : 1 pour les corps amorphes, 2 pour le calcul des projections tridimensionnelles et 3 pour le calcul des densités électroniques. Ce gain en temps de calcul, croissant très rapidement avec K , attira évidemment l'attention de certains chercheurs qui

en recommandèrent l'emploi en radiocristallographie (BONDOT, 1971 ; LIFCHITZ[†], 1971) (le lecteur intéressé par la FFT pourra consulter avec intérêt "COCHRAN, COOLEY & al. (1967)" et les nombreux articles qui suivirent dans les revues de traitement du signal et d'informatique surtout aux U.S.A.).

Mais on doit constater que malgré tout la FFT reste encore trop peu utilisée par les cristallographes, peut-être parce qu'elle nécessite l'utilisation de valeurs numériques complexes et peut ainsi poser des problèmes de taille mémoire rapide. Or, comme on le constatera par la suite, il s'avère possible dans la majorité des cas, non seulement de pallier cet inconvénient, mais également d'obtenir un gain sur la durée de calcul, de l'ordre de 2.

2. LES METHODES DE TRANSFORMATION DE FOURIER EN RADIOCRISTALLOGRAPHIE

Pour plus de clarté et de simplicité, sans perdre en généralité, nous analyserons en détail le cas unidimensionnel, les cas multidimensionnels n'apportant aucune variation essentielle à la méthodologie. D'autre part, nous nous préoccuperons uniquement dans ce chapitre de la transformation : espace réel \rightarrow espace réciproque ; la transformation inverse pouvant être traitée de manière tout-à-fait analogue.

Soit $K = 2N$ un nombre entier pair et $\{X_k\}$ la suite de valeurs réelles pour $k = 0, 1, 2, \dots, K-1$, à transformer. On comparera alors le déroulement de trois modes principaux de calcul de la TFD(K) de $\{X_k\}$, à savoir :

- méthode conventionnelle
- utilisation directe de la FFT(K)
- compactage + FFT(K/2) + transformation \hat{C}^{-1} .

Cette comparaison portera d'une part, sur le nombre d'opérations complexes à effectuer, additions et multiplications entre nombres complexes, et, d'autre part, sur le volume de mémoire rapide nécessaire. La Fig. III.1.

[†](voir appendice 3)

$K = 2N$ ici $K = 8$ <div> <div>Un mot réel Fortran</div> <div>Un mot complexe Fortran</div> </div>		Nombre de cellules mémoires nécessaires	Transformations linéaires possibles	Nombre d'opérations complexes nécessaires
		1 2		
Méthode "naïve" [variante]	a	$x_0, x_1, x_2, \dots, x_{K-2}, x_{K-1}$	K	
	b	<div>Application directe de la définition</div>	$2K+2$ [K+tampon de sortie]	Non $(K^2/2)+2K$ $[(K^2/2)+2K]$ +Temps de sortie
Algorithmes FFT	c	$x_0, 0, x_1, 0, x_2, 0, \dots, x_{K-2}, 0, x_{K-1}, 0$	2K	
	d	<div>FFT (K)</div>	2K	Oui $2K \log_2 K$
Virtuel	e	$x_0, 0, x_1, 0, x_2, 0, \dots, x_{K-2}, 0, x_{K-1}, 0$	2K	
	f	<div>Transformation C (virtuelle)</div>	2K	Oui Transformation virtuelle
FFT + Transformation \hat{C}^{-1}	g	<div>Compactage (virtuel)</div>	K	Oui Transformation virtuelle
	h	<div>FFT (N)</div>	K	Oui $K \log_2 K - K$
	i	<div>Transformation \hat{C}^{-1}</div>	K+2	Oui 2K
				Total: $K \log_2 K + K$

Fig. III.1. Les trois méthodes de transformation de Fourier : implantation des données à chaque étape de calcul, nombre d'opérations complexes et nombre de cellules mémoires nécessaires.

représente l'implantation des valeurs numériques en mémoire, ainsi que différents paramètres caractérisant ces 3 méthodes. La représentation a été faite ici pour $K = 8$; $R[\hat{Y}_k]$ et $I[\hat{Y}_k]$ désignent respectivement les parties réelle et imaginaire du nombre complexe Y_k , leurs adresses mémoires sont consécutives conformément aux normes du langage FORTRAN. On remarque qu'une valeur numérique complexe correspondant à la donnée de 2 valeurs numériques réelles nécessite un volume mémoire double.

2.1. Méthode conventionnelle

Lorsqu'il n'y a pas dispersion anormale, il existe les deux propriétés conjuguées :

ESPACE REEL	ESPACE RECIPROQUE
densité électronique réelle	loi de FRIEDEL :
	$\hat{X}_{k,l,m} = \hat{X}_{\bar{k},\bar{l},\bar{m}}$
	(N - 1) valeurs complexes indépendantes + 2 valeurs réelles :
K valeurs réelles indépendantes	K valeurs réelles indépendantes

Le calcul est donc limité à un demi-espace réciproque correspondant à K valeurs réelles.

Cette méthode qui consiste à appliquer "naïvement" et directement la définition de la TFD implique de conserver $\{X_k\}$ en unité centrale jusqu'au calcul du dernier point réciproque. Une utilisation de la mémoire de masse (bande magnétique, disque magnétique, tambour magnétique, etc...) caractérisée par sa lenteur relative, conduirait à des temps de transfert (mémoire de masse \rightarrow unité centrale) cumulés prohibitifs, car il serait nécessaire de transmettre $\{X_k\}$ en totalité pour le calcul de chaque point réciproque. Les valeurs calculées $\{\hat{X}_q\}$ peuvent elles-mêmes en totalité, s'accumuler en unité centrale (Fig. III.1a, b), plus couramment et plus judicieusement aussi, remplir une zone mémoire restreinte, multiple de la taille des enregistrements physiques de la mémoire de masse, servant ainsi de tampon de sortie vers celle-ci. Le gain en volume mémoire rapide peut être de l'ordre de 2, mais contrairement au cas précédent, le temps de transfert reste raisonnable, un

raffinement consistant à utiliser 2 tampons en bascule (transfert d'un tampon pendant le remplissage du second), lorsque l'ordinateur permet le mode de transfert asynchrone.

En conclusion, cette méthode classique, bien que très lente, conduit dans la variante avec tampon de sortie à une occupation mémoire proche de l'optimum K , et gagne en simplicité de programmation ce qu'elle n'a pas en performance. Elle peut toutefois s'avérer utile pour K petit ou lorsque la totalité du demi-espace réciproque n'est pas nécessaire, mais pour tous les autres cas, le grand nombre d'opérations nécessaire conduit à une précision numérique et une durée de calcul peu attrayantes.

2.2. Utilisation directe des algorithmes FFT(K)

Il existe trois types principaux d'algorithmes FFT : découpage en temps, découpage en fréquence, méthode de STOCKHAM. Les deux premiers, d'efficacité à peu près équivalente en pratique, nécessitent un reclassement des valeurs numériques en mémoire, respectivement en entrée et en sortie. Mais le calcul étant itératif, la TFD vient prendre finalement la place des données, contrairement à la méthode classique, en contribuant ainsi au gain de mémoire. Quant au troisième algorithme et ses variantes, bien que sans reclassement, ils ne permettent pas le calcul in-situ, et seront donc rejetés pour ce qui est de notre propos.

Le pouvoir d'accélération de ces algorithmes dépend beaucoup de la décomposition de K en facteurs premiers : $K = 2^p$ avec p entier donne des résultats proches de l'optimum théorique avec la possibilité d'une programmation aisée ; c'est ce choix qui sera fait en pratique. S'il s'avère nécessaire d'avoir $K \neq 2^p$, l'astucieux algorithme "Chirp z - transform" (RABINER, SCHAFER & RADER, 1969) permet de convertir un programme FFT à base 2 en un programme FFT à base arbitraire tout en conservant une excellente efficacité.

Mais l'inconvénient majeur des FFT pour le cristallographe, est de porter sur des nombres complexes, ce qui oblige à flanquer les K valeurs réelles envisagées de K valeurs imaginaires nulles (Fig. III.1, c)...

Il en résulte un espace réciproque complet après action de la FFT(K) (Fig. III.1, d). Si la relation de FRIEDEL pouvait intervenir, le volume mémoire et le nombre d'opérations nécessaires seraient réduits de moitié.

La FFT diminue considérablement le nombre d'opération à effectuer dans l'évaluation d'une TFD, alliant ainsi extrême rapidité et précision contrairement à l'utilisation directe de la relation de définition, mais l'utilisation mémoire ne sera pas optimisée dans la majorité des calculs radiocristallographiques.

2.3. Compactage suivi de FFT(K/2) et transformation \hat{C}^{-1}

Il s'agit de concilier les avantages de la FFT et le gain de mémoire possible lorsque la relation de FRIEDEL s'applique. Ceci a été récemment obtenu à 1 dimension sous certaines conditions restrictives (VERNET, 1971).

Dans ce qui suit, on étudiera une méthode qui, bien que différente, poursuit le même but, et s'utilise quelque soit la dimension de la TFD. Les K cellules mémoires contenant des valeurs nulles n'existent plus et une FFT(N) suffit à transformer les K données réelles. Son emploi pratique ne sera développé qu'après avoir établi quelques relations indispensables à l'exposé du principe en définissant ainsi les transformations C et \hat{C} .

3. LA REDUCTION DES CALCULS

3.1. La transformation C

On considérera tout au long du calcul les $\{X_{k,l,m}\}$ comme K.L.M. données tridimensionnelles réelles dont on se proposera de calculer la TFD(K,L,M) (A1.1) :

$$\{\hat{X}_{q,r,s}\} = \text{TFD}(K,L,M)\{X_{k,l,m}\}$$

On forme les ensembles $\{V_{k,l,m}\}$ et $\{W_{k,l,m}\}$ tels que :

$$\begin{cases} V_{k,\ell,m} = X_{k,\ell,m} & ; & W_{k,\ell,m} = 0 & \text{si } k \text{ pair} \\ V_{k,\ell,m} = 0 & ; & W_{k,\ell,m} = X_{k,\ell,m} & \text{si } k \text{ impair} \end{cases} \quad (\text{III.1})$$

où :

$$X_{k,\ell,m} = V_{k,\ell,m} + W_{k,\ell,m} \quad (\text{III.2})$$

Soit :

$$Y_{k,\ell,m} = V_{k,\ell,m} + iW_{k+1,\ell,m} \quad (\text{III.3})$$

et C la transformation qui fait passer de $\{X_{k,\ell,m}\}$ à $\{Y_{k,\ell,m}\}$.

3.1.1. C linéaire

Soit $\{S_{k,\ell,m}\}$ et $\{T_{k,\ell,m}\}$ deux suites de K.L.M. données réelles ; par la définition même de C :

$$C\{S_{k,\ell,m} + \lambda T_{k,\ell,m}\} = C\{S_{k,\ell,m}\} + \lambda C\{T_{k,\ell,m}\} \text{ pour tout } \lambda \text{ réel} \quad (\text{III.4})$$

3.1.2. C unitaire

Puisque les $\{X_{k,\ell,m}\}$ sont réelles, on vérifie immédiatement :

$$\sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} |Y_{k,\ell,m}|^2 = \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} X_{k,\ell,m}^2 \text{ pour } K \text{ pair} \quad (\text{III.5})$$

3.2. La transformation \hat{C}

\hat{C} est définie comme la transformation agissant sur $\text{TFD}(K,L,M)\{X_{k,\ell,m}\}$ pour donner $\text{TFD}(K,L,M)\{Y_{k,\ell,m}\}$ (Fig. III.2). On constate sur cette figure que $\hat{C} = \text{TFDoCoTFD}^{-1}$, où "o" désigne le produit de composition des applications. \hat{C} est donc unitaire avec C :

$$\sum_{q=0}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} |\hat{X}_{q,r,s}|^2 = 2 \sum_{q=0}^{N-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} |\hat{Y}_{q,r,s}|^2 \text{ pour } K = 2N \quad (\text{III.6})$$

par (A1.10) car d'après (III.1) et (III.3), $Y_{2k+1,\ell,m} \equiv 0$.

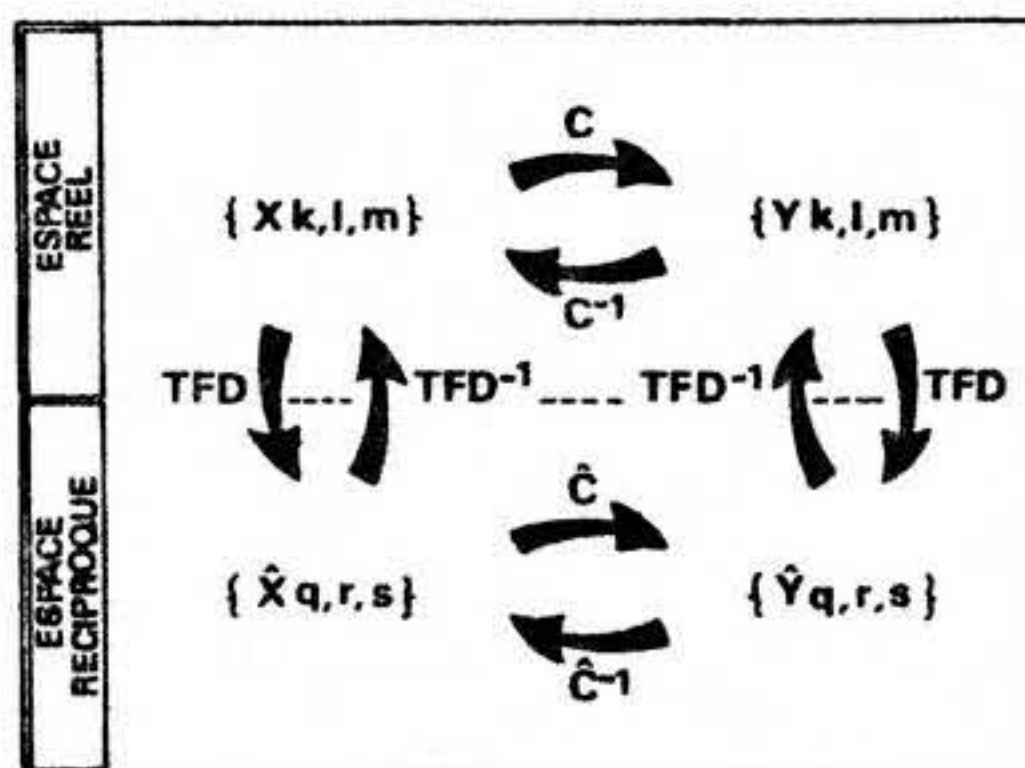


Fig. III.2. Les transformations C et \hat{C} .

3.3. Expression explicite de \hat{C} et \hat{C}^{-1}

Choisisant K pair en posant $K = 2N$, les propriétés de linéarité (A1.6) et de translation (A1.7) donnent immédiatement :

$$\hat{X}_{q,r,s} = \hat{V}_{q,r,s} + \hat{W}_{q,r,s} \quad (\text{III.7})$$

$$\hat{Y}_{q,r,s} = \hat{V}_{q,r,s} + i \exp(i\pi q/N) \hat{W}_{q,r,s} \quad (\text{III.8})$$

On peut donc écrire :

$$\begin{aligned} \hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^* &= \hat{V}_{N-q,L-r,M-s}^* + \hat{W}_{N-q,L-r,M-s}^* \\ \hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^* &= \hat{V}_{N-q,L-r,M-s}^* - i \exp[-i\pi(N-q)/N] \hat{W}_{N-q,L-r,M-s}^* \end{aligned}$$

La loi de Friedel (A1.9) s'applique à $\{V_{k,\ell,m}\}$ et $\{W_{k,\ell,m}\}$ réels :

$$\begin{aligned} \hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^* &= \hat{V}_{N+q,r,s} + \hat{W}_{N+q,r,s} \\ \hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^* &= \hat{V}_{N+q,r,s} + i \exp(i\pi q/N) \hat{W}_{N+q,r,s} \end{aligned}$$

Ainsi que les relations de dilatation d'échelle (A1.10) et (A1.11) :

$$\hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^* = \hat{V}_{q,r,s} - \hat{W}_{q,r,s} \quad (\text{III.7}')$$

$$\hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^* = \hat{V}_{q,r,s} - i \exp(i\pi q/N) \hat{W}_{q,r,s} \quad (\text{III.8}')$$

Eliminer $\hat{V}_{q,r,s}$ et $\hat{W}_{q,r,s}$ entre (III.7), (III.8), (III.7') et (III.8') permet d'obtenir les relations existant entre $\hat{X}_{q,r,s}$ et $\hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^*$ d'une part, et $\hat{Y}_{q,r,s}$, $\hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^*$ d'autre part, qui expriment ainsi \hat{C}^{-1} et \hat{C} :

$$\begin{aligned} (\text{III.9}) \quad \hat{C}^{-1} \begin{cases} \hat{X}_{q,r,s} &= [\hat{Y}_{q,r,s} + \hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^*] - i \exp(-i\pi q/N) [\hat{Y}_{q,r,s} - \hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^*] / 2 \\ \hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^* &= [\hat{Y}_{q,r,s} + \hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^*] + i \exp(-i\pi q/N) [\hat{Y}_{q,r,s} - \hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^*] / 2 \end{cases} \\ (\text{III.9}') \quad \hat{C} \begin{cases} \hat{Y}_{q,r,s} &= [\hat{X}_{q,r,s} + \hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^*] + i \exp(+i\pi q/N) [\hat{X}_{q,r,s} - \hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^*] / 2 \\ \hat{Y}_{N-q,L-r,M-s}^* &= [\hat{X}_{q,r,s} + \hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^*] - i \exp(+i\pi q/N) [\hat{X}_{q,r,s} - \hat{X}_{N-q,L-r,M-s}^*] / 2 \end{cases} \end{aligned}$$

3.4. Applications des transformations C , \hat{C} et \hat{C}^{-1} à la réduction des calculs

Imaginons les K éléments de l'espace réel $\{X_k\}$ rangés comme pour une FFT(K) (Fig. III.1, e) ; supposons encore que la transformation C agisse sur ces K nombres complexes (réels...) pour donner la suite $\{Y_k\}$ $k = 0, 1, 2, \dots, K-1$, et qu'elle soit suivie d'une opération de compactage permettant de ne conserver que les nombres Y_k en général non nuls puisque $Y_{2k+1} \equiv 0$ (Fig. III.1, g). La suite $\{Y_{2k}\}$ correspond alors à un stockage des données plus rationnel, identique à celui de la méthode conventionnelle (Fig. III.1, a). Ces opérations qui ne sont que virtuelles, n'ont pas à être effectuées en réalité, l'entrée en mémoire se faisant directement selon le schéma Fig. III.1, g ; elles justifient et expliquent néanmoins les étapes ultérieures du calcul. La propriété de dilatation d'échelle (A1.8) permet une FFT(N) pour évaluer $\{Y_q\} = \text{TFD}(K)\{Y_k\}$ en partant de la seule suite $\{Y_{2k}\}$ (Fig. III.1, h). Il suffit alors (Fig. III.2) de faire agir la transformation \hat{C}^{-1} sur les $\{Y_q\}$ pour obtenir finalement, en utilisant son expression explicite (III.9) les seuls points réciproques \hat{X}_q recherchés, en particulier dans cet exemple un demi-espace réciproque (Fig. III.1, i).

Le volume mémoire utilisé durant les 3 étapes réelles du calcul ne dépasse en aucun cas $(K + 2)$, étant ainsi optimum ; quant au nombre total d'opérations complexes à effectuer et par conséquent à la durée de calcul résultante, un bilan s'établit entre un gain dû à l'usage d'une FFT(N), plutôt que d'une FFT(K), et une perte impliquée par la nécessité d'une transformation \hat{C}^{-1} supplémentaire. Comme on pourra le constater sur la Fig. III.1, le bilan est largement positif en faveur de la méthode proposée, non seulement comparativement aux méthodes conventionnelles, mais aussi par rapport à l'usage d'une simple FFT(K).

Cette méthode permet tout aussi avantageusement de réaliser le passage : espace réciproque \rightarrow espace réel, selon un processus inverse du précédent : transformation \hat{C} suivie d'une FFT $^{-1}$ (N) (Fig. III.2), fournissant un résultat sous forme compacte.

L'utilisation pratique des groupes de relations (III.9) et (III.9') bénéficie de facteurs favorables dus à leur forme même :

- a) Les transformations \hat{C} et \hat{C}^{-1} peuvent être menées in-situ rendant ainsi effectif le gain en mémoire rapide.
- b) Pour les calculs numériques où $q = 0, 1, 2, \dots, [N/2]$, $[N/2]$ désignant la partie entière de $N/2$, l'usage de chacune des deux relations formant chaque groupe permet de couvrir exhaustivement l'intervalle $q = 0, 1, 2, \dots, N - 1$, en optimisant au maximum les calculs, du fait de leur similitude et de leur symétrie.
- c) (III.9) et (III.9') ne diffèrent que par un simple changement de signe (transformation de $+ i$ en $- i$) : un seul et même sous-programme réalisera les deux transformations \hat{C} et \hat{C}^{-1} comme c'est le cas en particulier pour $\text{FFT}(N)$ et $\text{FFT}^{-1}(N)$.

CONCLUSION ET PROSPECTIVE

Nous espérons avoir pu montrer sur quelques points précis, qui nous semblent non limitatifs, la valeur de l'intervention de la TFD en tant que telle dans l'analyse des calculs radiocristallographiques, celle-ci s'amplifiant par la possibilité d'évaluations numériques très rapides grâce aux divers algorithmes FFT (et dérivés).

Le caractère discret de la TFD permet une conception et une analyse des calculs très proches de leur concrétisation finale, mais présente, en outre, l'intérêt de pouvoir faire intervenir aisément toutes les possibilités et les méthodes du calcul matriciel comme cela a été simplement ébauché aux chapitres I et III. La formulation peut ainsi gagner en rigueur et simplicité notamment dans le domaine des méthodes directes.

La "Chirp z transform" dont nous n'avons signalé ici que les intéressantes potentialités (et celles-ci n'ont à notre connaissance, pas encore été exploitées dans le cadre des calculs radiocristallographiques) devrait dans un proche avenir nous conduire à réaliser un programme très souple adapté au calcul des densités électroniques de macromolécules et à l'affinement de leur structure.

Toutes ces possibilités nous incitent à l'optimisme quant à l'apparition (certainement à plus long terme...) de nouvelles méthodes directes, exploitant notamment les capacités de la FFT (e.g. processus itératifs entre l'espace direct et l'espace réciproque) et que le calcul conventionnel de la transformée de FOURIER, par son poids excessif (même pour de grands ordinateurs), dissuadait d'envisager sérieusement.

REFERENCES

- C.A. ANDREWS, J.M. DAVIES & G.R. SCHWARZ - (1967). Adaptive data compression. Proceedings of the IEEE, Vol. 55, n° 3, Mars, pp. 267-277.
- A. ANGOT - (1957). Compléments de mathématiques. Paris. Editions de la Revue d'Optique.
- J. ARSAC - (1961). Transformation de Fourier et théorie des distributions. Paris. Dunod.
- P. BONDOT - (1971). Application de la transformée de Fourier performante aux calculs cristallographiques. Acta Crystallographica, Vol. A27, Part 5, Septembre, pp. 492-494.
- W.T. COCHRAN, J.W. COOLEY, D.L. FAVIN, H.D. HELMS, R.A. KAENEL, W.W. LANG, G.C. MALING, JR, D.E. NELSON, C.M. RADDER & P.D. WELCH - (1967). What is the Fast Fourier Transform ? - IEEE Transactions on Audio and Electroacoustics, Vol. AU15, n° 2, Juin, pp. 45-55.
- J.W. COOLEY & J.W. TURKEY - (1965). An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series - Mathematics of computation, Vol. 19, Avril, pp. 297-301.
- H. CURIEN & M. TOURNARIE - 'Guide pratique pour l'utilisation de la transformation de Fourier. Publication A.D.R..
- N.T. GAARDER - (1972). A note on the multidimensional sampling theorem. Proceedings Letters, Proceeding of the IEEE, Vol. 60, n° 2, Février, pp. 247-248.
- D. GABOR - (1953). A summary of communication theory. Communication theory, W. JACKSON (Editor), Butterworths Scientific Publications, pp. 1-23.
- R. GAY - (1961). Cours de cristallographie, Livre III, Radiocristallographie théorique. Paris, Gauthier-Villars.
- R.W. JAMES - (1948). False detail in three dimensional Fourier representations of crystal structures. Acta Crystallographica, Vol. 1, Mars-Avril, pp. 132-134.
- O. MACCHI - (1973). Théorie statistique de la transmission de l'information en présence de bruit. Paris : ENSET.

- A.V. OPPENHEIM & C.J. WEINSTEIN - (1972). Effects of finite register length in digital filtering and the Fast Fourier Transform. Proceedings of the IEEE, Vol. 60, n° 8, Août, pp. 957-976.
- L.R. RABINER, R.W. SCHAFER & C.M. RADER - (1969). The Chirp z Transform Algorithm and its application. The Bell system Technical Journal, Vol. 48, n° 6, Mai-Juin, pp. 1249-1292.
- D.C. RIFE & G.A. VINCENT - (1970). Use of the Discrete Fourier Transform in the measurement of frequencies and level of tones. The Bell System Technical Journal, Vol. 49, n° 2, Février, pp. 197-228.
- A.J. ROSE & A. RIMSKY - (1949). Méthode de calcul pour la sommation des séries de Fourier : coordonnées polaires. Bulletin de la Société française de Minéralogie et de Cristallographie, Tome 72, pp. 305-318.
- J.L. VERNET, P. DELEPINE & J.C. CONSTANTIN - (1970). Transformateur de Fourier rapide à mémoires circulantes. Journées d'études sur les techniques de représentation des signaux et leurs applications. Nice, 21 au 24 Septembre.
- J.L. VERNET - (1971). Real signals Fast Fourier Transform : Storage Capacity and step number reduction by means of an Odd Discrete Fourier Transform. Proceedings Letters, Proceeding of the IEEE, Vol. 59, n° 10, Octobre, pp. 1531-1532.

A P P E N D I C E 1

DEFINITION ET (quelques) PROPRIETES DE LA TRANSFORMATION
DE FOURIER DISCRETE

1. DEFINITION ET NOTATIONS

$\{X_{k,\ell,m}\}$ désignera la suite discrète de K.L.M. échantillons $X_{k,\ell,m}$, en général de valeurs complexes, avec :

$$k = 0, 1, \dots, K-1 ; \ell = 0, 1, \dots, L-1 ; m = 0, 1, \dots, M-1$$

On définit alors la transformation de FOURIER discrète (représentée dans ce qui suit par l'abréviation TFD) des K.L.M. valeurs $X_{k,\ell,m}$, par les K.L.M. relations :

$$\begin{cases} \hat{X}_{q,r,s} = \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} X_{k,\ell,m} \exp \left[-i2\pi \left(\frac{kq}{K} + \frac{\ell r}{L} + \frac{ms}{M} \right) \right] \\ q = 0, 1, \dots, K-1 ; r = 0, 1, \dots, L-1 ; s = 0, 1, \dots, M-1 \end{cases} \quad (A1.1)$$

les valeurs $\{\hat{X}_{q,r,s}\}$ constituant donc les éléments de la TFD tridimensionnelle d'ordre (K,L,M) des $\{X_{k,\ell,m}\}$, que l'on notera de façon plus compacte par :

$$\{\hat{X}_{q,r,s}\} = \text{TFD}(K,L,M)\{X_{k,\ell,m}\} \quad (A1.2)$$

2. RECIPROCITE

La transformation définie par (A1.1) est inversible :

$$X_{k,\ell,m} = \frac{1}{K \cdot L \cdot M} \sum_{q=0}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} \hat{X}_{q,r,s} \exp \left[+i2\pi \left(\frac{kq}{K} + \frac{\ell r}{L} + \frac{ms}{M} \right) \right] \quad (A1.3)$$

et pourra se noter :

$$\{X_{k,\ell,m}\} = \text{TFD}^{-1}(K,L,M)\{\hat{X}_{q,r,s}\} \quad (A1.4)$$

3. PERIODICITE

La périodicité tridimensionnelle des fonctions $\exp[\pm i2\pi(\frac{kq}{K} + \frac{\ell r}{L} + \frac{ms}{M})]$ implique celle des suites $\{X_{k,\ell,m}\}$ et $\{\hat{X}_{q,r,s}\}$ obtenues par les relations (A1.3) et (A1.1) :

$$\begin{cases} X_{k+tK, \ell+uL, m+vM} = X_{k,\ell,m} \\ \hat{X}_{q+tK, r+uL, s+vM} = \hat{X}_{q,r,s} \end{cases} \quad (A1.5)$$

Par la suite, les deux ensembles de valeurs $\{X_{k,\ell,m}\}$ et $\{\hat{X}_{q,r,s}\}$ représenteront donc chacun, plus précisément, avec t, u et v entiers relatifs arbitraires, une classe d'équivalence modulo une translation (tK, uL, vM) .

4. LINEARITE

Les transformations TFD et TFD^{-1} définies par des sommes, sont linéaires :

$$\begin{cases} \text{TFD}(K, L, M)\{X_{k,\ell,m} + \lambda Y_{k,\ell,m}\} = \{\hat{X}_{q,r,s}\} + \{\lambda \hat{Y}_{q,r,s}\} \\ \text{TFD}^{-1}(K, L, M)\{\hat{X}_{q,r,s} + \lambda \hat{Y}_{q,r,s}\} = \{X_{k,\ell,m}\} + \{\lambda Y_{k,\ell,m}\} \end{cases} \quad (A1.6)$$

avec λ valeur complexe arbitraire.

5. TRANSLATION

Pour t, u et v , trois entiers relatifs définissant une translation tridimensionnelle, on obtient à partir des définitions (A1.3) et (A1.1) :

$$\begin{cases} \text{TFD}(K, L, M)\{X_{k-t, \ell-u, m-v}\} = \{\hat{X}_{q,r,s} \exp[-i2\pi(\frac{qt}{K} + \frac{ru}{L} + \frac{sv}{M})]\} \\ \text{TFD}^{-1}(K, L, M)\{\hat{X}_{q-t, r-u, s-v}\} = \{X_{k,\ell,m} \exp[+i2\pi(\frac{kt}{K} + \frac{\ell u}{L} + \frac{mv}{M})]\} \end{cases} \quad (A1.7)$$

6. CONVOLUTION - THEOREME DE BOREL DISCRET

La propriété caractéristique de la TF continue, exprimée par le théorème de BOREL (CURIEN & TOURNARIE, p. 13), de transformer un produit de convolution continu en produit ordinaire, s'étend aisément, par la TFD, aux suites discrètes ; en effet, ayant défini le produit de convolution cyclique (ou périodique) de deux suites périodiques $\{X_{k,\ell,m}\}$ et $\{Y_{k,\ell,m}\}$ par :

$$\begin{aligned} \{X_{k,\ell,m}\} * \{Y_{k,\ell,m}\} &= \{Y_{k,\ell,m}\} * \{X_{k,\ell,m}\} \\ &= \sum_{h=0}^{K-1} \sum_{i=0}^{L-1} \sum_{j=0}^{M-1} X_{h,i,j} \cdot Y_{k-h,\ell-i,m-j} \end{aligned}$$

où les triplets d'indices sont pris respectivement modulo K, L et M, les propriétés (A1.7) et (A1.6) permettent d'écrire :

$$\begin{aligned} \{X_{k,\ell,m}\} * \{Y_{k,\ell,m}\} &= \text{TFD}^{-1}(K,L,M) \{\hat{X}_{q,r,s} \cdot \hat{Y}_{q,r,s}\} \\ \{\hat{X}_{q,r,s}\} * \{\hat{Y}_{q,r,s}\} &= K.L.M. \text{TFD}(K,L,M) \{X_{k,\ell,m} \cdot Y_{k,\ell,m}\} \end{aligned} \quad (\text{A1.8})$$

7. LOI DE FRIEDEL - SYMETRIE HERMITIENNE

$$\{X_{k,\ell,m}\} \text{ réels} \iff \hat{X}_{q,r,s} = \hat{X}_{K-q,L-r,M-s}^* \quad (\text{A1.9})$$

* dénotant la conjugaison complexe.

8. DILATATION D'ECHELLE

On examinera ici une propriété particulière à la TFD, base de la méthode de réduction de son calcul numérique (chapitre III). K sera choisi pair (grande majorité des cas pratiques) en posant $K = 2N$.

8.1. Supposons de plus que $X_{k,\ell,m} \equiv 0$ pour $k = 1, 3, \dots, K-3, K-1$.

La définition (A1.1) donne alors directement :

$$\hat{X}_{q,r,s} = \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} X_{2k,\ell,m} \exp\left[-i2\pi\left(\frac{kq}{N} + \frac{\ell r}{L} + \frac{ms}{M}\right)\right]$$

relation qui signifie que :

$$\begin{cases} X_{2k+1,\ell,m} \equiv 0 \iff \{\hat{X}_{q,r,s}\} = \text{TFD}(N,L,M)\{X_{2k,\ell,m}\} \iff \hat{X}_{q,r,s} = \hat{X}_{q+N,r,s} \\ K = 2N \end{cases} \quad (\text{A1.10})$$

8.2. Supposons au contraire que $X_{k,\ell,m} \equiv 0$ pour $k = 0, 2, \dots, K-2, K$.

$$\hat{X}_{q,r,s} = \exp(-i\frac{2\pi q}{K}) \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} X_{2k+1,\ell,m} \exp\left[-i2\pi\left(\frac{kq}{N} + \frac{\ell r}{L} + \frac{ms}{M}\right)\right]$$

On en déduit comme précédemment :

$$\begin{cases} X_{2k,\ell,m} \equiv 0 \iff \{\exp(+i\frac{2\pi q}{K})\hat{X}_{q,r,s}\} = \text{TFD}(N,L,M)\{X_{2k+1,\ell,m}\} \iff \hat{X}_{q,r,s} = -\hat{X}_{q+N,r,s} \\ K = 2N \end{cases} \quad (\text{A1.11})$$

9. CONSERVATION DE LA NORME - THEOREME DE PARSEVAL - VARIANCE

La TFD transformation unitaire conserve le produit scalaire hermitien.

9.1. Conservation du produit scalaire hermitien

$$\sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} X_{k,\ell,m} \cdot Y_{k,\ell,m}^* = \frac{1}{K \cdot L \cdot M} \sum_{q=0}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} \hat{X}_{q,r,s} \cdot \hat{Y}_{q,r,s}^* \quad (\text{A1.12})$$

9.2. Conservation de l'énergie. Théorème de PARSEVAL

L'application particulière de (A1.12) avec $\{Y_{k,\ell,m}\} \equiv \{X_{k,\ell,m}\}$ donne :

$$\sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} |X_{k,\ell,m}|^2 = \frac{1}{K \cdot L \cdot M} \sum_{q=0}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} |\hat{X}_{q,r,s}|^2 \quad (A1.13)$$

9.3. Expression dans l'espace réciproque de la variance des valeurs de l'espace direct

Définissons la valeur moyenne des $\{X_{k,\ell,m}\}$:

$$\bar{X} = \frac{1}{K \cdot L \cdot M} \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} X_{k,\ell,m}$$

et leur variance par :

$$\sigma^2 = \frac{1}{K \cdot L \cdot M} \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} |X_{k,\ell,m} - \bar{X}|^2$$

L'expression de σ^2 se développe :

$$\sigma^2 = \frac{1}{K \cdot L \cdot M} \left[\sum_{k=0}^{K-1} \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} |X_{k,\ell,m}|^2 \right] - |\bar{X}|^2$$

et puisque d'après la définition (A1.1) :

$$\bar{X} = \hat{X}_{0,0,0} / K \cdot L \cdot M$$

le théorème de PARSEVAL (A1.13) donne :

$$\sigma^2 = \frac{1}{K^2 \cdot L^2 \cdot M^2} \left[\sum_{q=0}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} |\hat{X}_{q,r,s}|^2 \right] - |\hat{X}_{0,0,0}|^2$$

où encore :

$$\sigma^2 = \frac{1}{K^2 \cdot L^2 \cdot M^2} \sum_{\substack{q=0 \\ q+r+s \neq 0}}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} |\hat{X}_{q,r,s}|^2 \quad (A1.14)$$

L'évaluation de la variance σ^2 peut donc se faire indépendamment de la connaissance du terme $\hat{X}_{0,0,0}$ ainsi que des phases des $\{\hat{X}_{q,r,s}\}$.

9.4. Relation entre variances de l'espace direct et de l'espace réciproque

On définira comme précédemment les quantités homologues de \bar{X} et σ^2 , dans l'espace réciproque :

$$\bar{\hat{X}} = \frac{1}{K.L.M} \sum_{q=0}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} \hat{X}_{q,r,s} ; \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{K.L.M} \sum_{q=0}^{K-1} \sum_{r=0}^{L-1} \sum_{s=0}^{M-1} |\hat{X}_{q,r,s} - \bar{\hat{X}}|^2$$

Il existe alors entre σ^2 et $\hat{\sigma}^2$ la relation suivante :

$$K.L.M. \hat{\sigma}^2 - |\hat{X}_{0,0,0}|^2 = K.L.M. [K.L.M. \sigma^2 - |X_{0,0,0}|^2] \quad (A1.15)$$

10. FACTORISATION

Compte tenu des propriétés de la fonction $\exp(\)$, la définition (A1.1) peut se réécrire sous la forme :

$$\hat{X}_{q,r,s} = \sum_{k=0}^{K-1} \left[\sum_{\ell=0}^{L-1} \left[\sum_{m=0}^{M-1} X_{k,\ell,m} \exp(-i \frac{2\pi m s}{M}) \right] \exp(-i \frac{2\pi \ell r}{L}) \right] \exp(-i \frac{2\pi k q}{K}) \quad (A1.16)$$

qui devient symboliquement :

$$\{\hat{X}_{q,r,s}\} = \text{TFD}(K,L,M)\{X_{k,\ell,m}\} = \text{TFD}(K)\{\text{TFD}(L)\{\text{TFD}(M)\{X_{k,\ell,m}\}\}\} \quad (A1.17)$$

La factorisation décrite par (A1.17) n'est pas la seule possible : les TFD unidimensionnelles peuvent commuter, chaque permutation du triplet (K,L,M) conduisant à une expression valable du type (A1.17). La plupart des propriétés des TFD multidimensionnelles peuvent ainsi, grâce à cette propriété de factorisation (qui existe de même pour les TF multidimensionnelles continues (ARSAC, 1961, p. 117)), se déduire aisément de celles de la TFD unidimensionnelle.

Cette propriété générale, ramenant toujours ainsi le calcul d'une TFD multidimensionnelle à l'évaluation itérative de TFD unidimensionnelles, autorise souvent, de ce fait, une plus grande souplesse dans la conduite pratique des calculs numériques et peut même réduire théoriquement le nombre d'opérations arithmétiques impliquées par ceux-ci. En effet, le calcul d'une TFD à partir de sa définition, requiert un nombre d'opérations élémentaires A proportionnel au carré du nombre de données de l'espace direct (le calcul de chaque \hat{X} nécessite l'emploi de toutes les valeurs $\{X\} \dots$) :

$$A(K,L,M) = (K.L.M)^2 \quad (A1.18)$$

alors que par factorisation unidimensionnelle le nombre d'opérations élémentaires B vaut :

$$B(K,L,M) = K.L.A(1,1,M) + K.M.A(1,L,1) + L.M.A(K,1,1)$$

et donc par (A1.18) :

$$B(K,L,M) = (K.L.M).(K + L + M) \quad (A1.19)$$

d'où :

$$\frac{A(K,L,M)}{B(K,L,M)} > 1$$

car :

$$(K + L + M) < (K.L.M) \text{ pour } \begin{cases} K > 1 \\ L > 1 \\ M > 1 \end{cases}$$

Il y a réduction des calculs dans le rapport $(K.L.M)/(K + L + M)$ par un processus très semblable à celui qu'exploitent les divers algorithmes FFT.

A P P E N D I C E 2

FONCTIONS D'INTERPOLATION $S(K,x)$ 1. EXPRESSIONS EXPLICITES DE $S(K,x)$

On se propose de calculer l'expression explicite de la somme :

$$T(K,x) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \text{sinc}(x-K\ell) \quad (\text{A2.1})$$

Il sera fait appel, pour cette évaluation, à quelques propriétés classiques de la TF continue et de distributions tempérées comme celles de DIRAC et POISSON.

$T(K,x)$, somme de translatées de la fonction $\text{sinc } x$, peut prendre la forme d'un produit de convolution (apériodique), où δ représente la distribution de DIRAC :

$$T(K,x) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} [\text{sinc } x \otimes \delta(x-K\ell)]$$

et d'après la distributivité du produit de convolution par rapport à l'addition :

$$T(K,x) = \text{sinc } x \otimes \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \delta(x-K\ell) \quad (\text{A2.2})$$

$TF[]$ désignant l'opérateur TF continue, (A2.2) devient par application du théorème de BOREL :

$$TF[T(K,x)] = TF[\text{sinc } x] \cdot TF\left[\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \delta(x-K\ell)\right] \quad (\text{A2.3})$$

La dernière TF de l'expression précédente portant sur une distribution de POISSON produit à nouveau une distribution de même nature qui, pour la variable réciproque u de x , s'écrira :

$$TF\left[\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \delta(x-K\ell)\right] = \frac{1}{K} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \delta\left(u - \frac{k}{K}\right) \quad (\text{A2.4})$$

Par ailleurs, $TF[\text{sinc } x]$ constitue une fonction telle que :

$$\begin{aligned} TF[\text{sinc } x] &= 1 \quad \text{pour } u \in]-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}[\\ TF[\text{sinc } x] &= \frac{1}{2} \quad \text{pour } |u| = \frac{1}{2} \\ TF[\text{sinc } x] &= 0 \quad \text{pour } u \notin [-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}] \end{aligned} \quad (A2.5)$$

Dans le calcul de (A2.3), la fonction $TF[\text{sinc } x]$ va donc se comporter comme une "fenêtre", sélectionnant dans l'expression (A2.4) les seules distributions δ centrées sur un point d'abscisse appartenant à l'intervalle fermé $[-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}]$; pour expliciter (A2.3), les discontinuités de (A2.5) pour $|u| = \frac{1}{2}$ conduiront ainsi à distinguer 2 cas différents suivant la parité de K (\hat{T} et \tilde{T} désigneront les 2 formes de T , respectivement pour K impair et K pair) :

a) K impair

Dans la relation (A2.4), le rapport $\frac{k}{K}$ diffère nécessairement de $\pm\frac{1}{2}$; aucune distribution δ n'est donc centrée en $u = \pm\frac{1}{2}$:

$$TF[T(K, x)] = \frac{1}{K} \sum_{k=-(K-1)/2}^{(K-1)/2} \delta(u - \frac{k}{K}) \quad (A2.6)$$

Nous remarquons au passage que la périodicité de $T(K, x)$, établie directement à partir de sa définition (A2.1), conduit bien à un spectre discret.

Puisque $TF^{-1}[\delta(u-a)] = \exp(i2\pi ax)$:

$$T(K, x) = \frac{1}{K} \sum_{k=-(K-1)/2}^{(K-1)/2} \exp(\frac{i2\pi kx}{K}) \quad (A2.7)$$

(A2.7) constitue la somme des termes d'une progression géométrique, qui après quelques simplifications vaut :

$$T(K, x) = \hat{T}(K, x) = \frac{1}{K} \frac{\sin \pi x}{\sin \pi(x/K)} \quad (A2.8)$$

b) K_pair

Les discontinuités de $TF[\text{sinc } x]$ interviennent dans ce cas pour modifier la forme de $TF[T(K,x)]$ et donc de $T(K,x)$:

$$TF[T(K,x)] = \frac{1}{2K} \left[\delta(u + \frac{1}{2}) + \delta(u - \frac{1}{2}) \right] + \frac{1}{K} \sum_{k=-(K-2)/2}^{(K-2)/2} \delta(u - \frac{k}{K}) \quad (A2.9)$$

d'où $T(K,x)$ comme pour (A2.8) :

$$T(K,x) = \frac{\cos \pi x}{K} + \frac{1}{K} \frac{\sin \pi((K-1)x/K)}{\sin \pi(x/K)}$$

qui se simplifie en :

$$T(K,x) = \mathcal{T}(K,x) = \frac{1}{K} \frac{\sin \pi x}{\text{tg } \pi(x/K)} \quad (A2.10)$$

La relation existant entre $S(K,x)$ et $T(K,x)$ s'écrit, d'après (I.15) et (A2.1) :

$$S(K,x) = T(K,Kx) \quad (A2.11)$$

d'où résultent les deux expressions possibles de $S(K,x)$ selon la parité de K :

$$\begin{cases} K \text{ impair} & \mathcal{S}(K,x) = \frac{1}{K} \frac{\sin \pi Kx}{\sin \pi x} \\ K \text{ pair} & \mathcal{S}(K,x) = \frac{1}{K} \frac{\sin \pi Kx}{\text{tg } \pi x} \end{cases} \quad (A2.12)$$

Ces expressions vérifient bien, toutes deux, les propriétés (I.17), (I.18), (I.19) et (I.19') établies directement au chapitre I.

2. ESPACES VECTORIELS DES FONCTIONS D'INTERPOLATION $S(K,x)$

2.1. TF de $\mathcal{S}(K,x)$ et $\mathcal{T}(K,x)$

Ces fonctions étant périodiques, il s'agit ici plus précisément de leurs développements en série de Fourier qui s'écrivent d'après (A2.6), (A2.9) et le changement de variable (A2.11) :

$$\left\{ \begin{array}{ll} K \text{ impair} & \text{TF} [\hat{S}(K, x)] = \frac{1}{K} \sum_{q=-(K-1)/2}^{(K-1)/2} \delta(u-q) \\ K \text{ pair} & \text{TF} [\hat{S}(K, x)] = \frac{1}{2K} [\delta(u+\frac{K}{2}) + \delta(u-\frac{K}{2})] + \frac{1}{K} \sum_{q=-(K-2)/2}^{(K-2)/2} \delta(u-q) \end{array} \right. \quad (\text{A2.13})$$

2.2. Relations d'orthogonalité

Définissons le produit scalaire (hermitien) de deux fonctions $X(x)$ et $Y(x)$, non nécessairement réelles, de la variable réelle " x ", périodiques de période unité, par :

$$\langle X(x), Y(x) \rangle = \int_{-1/2}^{+1/2} X(x) \cdot Y^*(x) dx \quad (\text{A2.14})$$

Soit encore $\hat{X}(u)$ et $\hat{Y}(u)$ les développements en série de FOURIER respectifs de $X(x)$ et $Y(x)$:

$$\begin{aligned} \hat{X}(u) &= \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \hat{X}(q) \delta(u-q) \\ \hat{Y}(u) &= \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \hat{Y}(q) \delta(u-q) \end{aligned} \quad (\text{A2.15})$$

La TF continue, transformation unitaire, laisse le produit scalaire invariant (théorème de PARSEVAL) :

$$\langle X(x), Y(x) \rangle = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \hat{X}(q) \hat{Y}^*(q) \quad (\text{A2.16})$$

En particulier l'intégrale sur une période de la fonction $S(K, x+x_0)$ peut s'évaluer immédiatement par application de (A2.16) avec $\text{TF}[1] = \delta(u)$:

$$\int_{-1/2}^{+1/2} S(K, x+x_0) dx = \langle S(K, x+x_0), 1 \rangle = \frac{1}{K} \quad (\text{A2.17})$$

Dans l'espace vectoriel des fonctions $X(x)$ réelles, la relation (A2.14) définissant la norme, nous étudierons les propriétés d'orthogonalité des fonctions d'interpolation $S(K, x)$, propriétés qui diffèrent selon la parité de K :

a) K impair

TF $[\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})]$ s'écrit, d'après (A2.13) :

$$\text{TF}[\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})] = \sum_{q=-(K-1)/2}^{(K-1)/2} \exp\left[-\frac{12\pi qk}{K}\right] \delta(u-q)/K \quad (\text{A2.18})$$

et la relation (A2.16) donne donc :

$$\langle \hat{S}(K, x - \frac{k}{K}), \hat{S}(K, x - \frac{l}{K}) \rangle = \sum_{q=-(K-1)/2}^{(K-1)/2} \exp\left[-\frac{12\pi q(k-l)}{K}\right] / K^2 \quad (\text{A2.19})$$

Le second membre de cette relation, semblable à (A2.7), peut encore s'écrire :

$$\langle \hat{S}(K, x - \frac{k}{K}), \hat{S}(K, x - \frac{l}{K}) \rangle = \frac{1}{K} \hat{\gamma}(K, k-l)$$

d'où avec $\delta_{k,l}$ désignant le symbole de KRONECKER ($\delta_{k,l} = 0$ si $k \neq l$; $\delta_{k,l} = 1$ si $k = l$) :

$$\langle \hat{S}(K, x - \frac{k}{K}), \hat{S}(K, x - \frac{l}{K}) \rangle = \frac{\delta_{k,l}}{K} \quad (\text{A2.20})$$

Les fonctions $\frac{1}{\sqrt{K}} \frac{\sin \pi K(x - (k/K))}{\sin \pi(x - (k/K))}$ pour $k = 0, 1, \dots, K-1$, forment donc, munies de la norme (A2.14), une base de K vecteurs orthoormés.

b) K pair

Contrairement aux $\hat{S}(K, x - \frac{k}{K})$, les fonctions $\hat{S}_v(K, x - \frac{k}{K})$ ne sont pas orthogonales. En effet :

$$\text{TF}[\hat{S}_v(K, x - \frac{k}{K})] = \frac{(-1)^k}{2K} [\delta(u + \frac{K}{2}) + \delta(u - \frac{K}{2})] + \sum_{q=-(K-2)/2}^{(K-2)/2} \exp\left[-\frac{12\pi qk}{K}\right] \delta(u-q)/K \quad (\text{A2.21})$$

et (A2.16) conduit maintenant à une expression plus complexe que (A2.19) :

$$\begin{aligned}
\langle S_{\nu}(K, x - \frac{k}{K}), S_{\nu}(K, x - \frac{l}{K}) \rangle &= \frac{(-1)^{k-l}}{2K^2} + \frac{1}{K^2} \sum_{q=-(K-2)/2}^{(K-2)/2} \exp\left[-\frac{12\pi q(k-l)}{K}\right] \\
&= \frac{1}{K^2} \left[\frac{(-1)^{k-l}}{2} + \frac{\sin\pi(K-1)(k-l)/K}{\sin\pi(k-l)/K} \right]
\end{aligned}$$

qui donne pour les différentes valeurs de $(k-l)$:

$$\langle S_{\nu}(K, x - \frac{k}{K}), S_{\nu}(K, x - \frac{l}{K}) \rangle = -\frac{(-1)^{k-l}}{2K^2} + \frac{\delta_{k,l}}{K} \quad (A2.22)$$

La relation (A2.22) diffère de (A2.20) par la présence d'un terme d'"interférence" $\frac{(-1)^{k-l}}{2K^2}$ lié à la parité de la différence $(k-l)$.

A P P E N D I C E 3

"LISTINGS" DES SOUS-PROGRAMMES ABC, REV ET MIR

Nota :

- ABC gère REV, qui appelle lui-même MIR.
La séquence d'utilisation se réduit donc à :

```
CALL  ABC(FT,K,L,M,ISIGN)
```

En retour de cet appel ABC restitue le tableau FT transformé.

- Le traitement en monoindilage du tableau FT dans ABC, contribue à la réduction du temps total d'exécution (voir commentaires pour son estimation).

```

SUBROUTINE ABC(FT,K,L,M,ISIGN)
TRANSFORMATION DE FOURIER DISCRETE DU TABLEAU TRIDIMENSIONNEL
COMPLEXE FT(K,L,M) PAR L'ALGORITHME FFT DE COOLEY-TUKEY (DECOUPAGE
DANS LE 'TEMPS' AVEC RENVERSEMENT DES BITS ) .
ISIGN=-1    T.F.D DIRECTE .
ISIGN=+1    T.F.D INVERSE .
LA TRANSFORMATION SE REALISE IN-SITU .
LOG2(K),LOG2(L) ET LOG2(M) SONT DES ENTIERS POSITIFS OU NULS .
USAGE A 1 DIMENSION ET 2 DIMENSIONS AVEC K OU L OU M = 1 .
DUREE D'EXECUTION APPROXIMATIVE 1.28E-5*(K*L*M)*LOG2(K*L*M)
SECONDES SUR IBM 370/168 .
UTILISE SOUS-PROGRAMME REV .

COMPLEX FT(1),FX,FY,V,W,F
DIMENSION IM(3),IN(3),ICA(3)

CALCUL DE IM(J)
K=2**IM(1),L=2**IM(2),M=2**IM(3)
IM(1)=K
IM(2)=L
IM(3)=M
DO 15 J=1,3
  IA=1
  IB=0
11 IC=IM(J)-IA
  IF(IC)12,15,10
10 IA=IA+IA
  IB=IB+1
  GO TO 11
15 IM(J)=IB

TEST DES PARAMETRES
IF(ISIGN*ISIGN)12,12,17
12 PRINT 100,K,L,M,ISIGN
100 FORMAT(' * ERREUR ABC * ',4I11)
RETURN

REORGANISATION DU TABLEAU FT(K,L,M)
17 CALL REV(FT,K,L,M)

CLASSEMENT POINTEURS DE LA BOUCLE DE SOMMATION
IN(1)=1
IN(2)=2
IN(3)=3
DO 75 ID=1,2
  IA=IN(1)
  IB=IN(2)
  IF(IM(IB)-IM(IA))76,77,77
76 IN(1)=IB
  IN(2)=IA
77 IB=IN(2)
  IC=IN(3)
  IF(IM(IC)-IM(IB))78,75,75
78 IN(2)=IC
  IN(3)=IB
75 CONTINUE

INITIALISATION
II=1
II2=2
ICC=ISIGN
KL=K*L
KLM=KL*M
IK=K
IK2=K+K
IKL=KL
IKL2=KL+KL

```



```

C      DO 80 J=1,3
      ICA(J)=0
      IF(IM(J))80,80,81
81    ICA(J)=1
80    CONTINUE

```

```

C      CHOIX DE IMIN
      IA=0
      DO 85 J=1,3
      IB=IN(J)
      IMIN=IM(IB)-IA
      IF(IMIN)16,16,21

```

```

C      SOMMATION
21    DO 20 IC=1,IMIN
      F=(0.0,1.0)
      F=F*(3.14159265359/ICC)
      W=CEXP(F)

```

```

C      SOMME SUR K
      IF(ICA(1))24,24,23
23    V=(1.0,0.0)
      DO 25 IA=1,II
      DO 30 IB=IA,K,II2
      DO 30 IC=IB,KL,K
      DO 30 ID=IC,KLM,KL
      IE=ID+II
      FX=FT(ID)
      FY=FT(IE)*V
      FT(ID)=FX+FY
30    FT(IE)=FX-FY
25    V=V*W

```

```

C      SOMME SUR L
24    IF(ICA(2))27,27,26
26    V=(1.0,0.0)
      DO 35 IA=K,IK,K
      DO 40 IB=1,K
      IF=IA+IB-K
      DO 40 IC=IF,KL,IK2
      DO 40 ID=IC,KLM,KL
      IE=ID+IK
      FX=FT(ID)
      FY=FT(IE)*V
      FT(ID)=FX+FY
40    FT(IE)=FX-FY
35    V=V*W

```

```

C      SOMME SUR M
27    IF(ICA(3))22,22,28
28    V=(1.0,0.0)
      DO 45 IA=KL,IKL,KL
      DO 50 IB=1,K
      IF=IA+IB-KL
      DO 50 IC=IF,IA,K
      DO 50 ID=IC,KLM,IKL2
      IE=ID+IKL
      FX=FT(ID)
      FY=FT(IE)*V
      FT(ID)=FX+FY
50    FT(IE)=FX-FY
45    V=V*W
22    II=II+II
      II2=II2+II2
      IK=IK+IK

```

```

      IK2=IK2+IK2
      IKL=IKL+IKL
      IKL2=IKL2+IKL2
C    20 ICC=ICC+ICC
C
C    16 IB=IN(J)
      IA=IM(IB)
C    85 ICA(IB)=0
C
C    NORMALISATION
      IF(ISIGN)19,19,29
C    29 C=1.0/KLM
      DO 90 IA=1,KLM
C    90 FT(IA)=FT(IA)*C
C    19 RETURN
      END

```

```

SUBROUTINE REV(FT,K,L,M)
C REORGANISATION DES VALEURS DU TABLEAU TRIDIMENSIONNEL COMPLEXE
C FT(K,L,M) POUR LA FFT. LES VALEURS FT(KA,LA,MA) ET FT(KB,LB,MB)
C NE SONT PERMUTEES QUE POUR ADRESSE(FT(KB,LB,MB)) SUPERIEURE A
C ADRESSE(FT(KA,LA,MA)) . UTILISE LA FONCTION MIR .

COMPLEX FT(K,L,M),F
DO 10 MA=1,M
MM=MIR(MA-1,M)+1
IF(MM-MA)10,11,21
21 DO 20 LA=1,L
LL=MIR(LA-1,L)+1
DO 20 KA=1,K
KK=MIR(KA-1,K)+1
F=FT(KA,LA,MA)
FT(KA,LA,MA)=FT(KK,LL,MM)
20 FT(KK,LL,MM)=F
GO TO 10
11 DO 10 LA=1,L
LL=MIR(LA-1,L)+1
IF(LL-LA)10,12,16
16 DO 15 KA=1,K
KK=MIR(KA-1,K)+1
F=FT(KA,LA,MA)
FT(KA,LA,MA)=FT(KK,LL,MM)
15 FT(KK,LL,MM)=F
GO TO 10
12 DO 10 KA=1,K
KK=MIR(KA-1,K)+1
IF(KK-KA)10,10,13
13 F=FT(KA,LA,MA)
FT(KA,LA,MA)=FT(KK,LL,MM)
FT(KK,LL,MM)=F
10 CONTINUE
RETURN
END

```


FUNCTION MIR(I,K)

MIR EST LE NOMBRE MIRROR DE I POUR UNE REPRESENTATION BINAIRE SUR
N=LOG2(K) BITS C'EST-A-DIRE $K=2^{*N}$. I DOIT EVIDEMMENT APPARTENIR
A L'INTERVALLE FERME (0,K-1).

KA=K

IA=1

MIR=0

1 IF((KA-1)*IA)3,3,2

2 KA=KA/2

IB=IA/2

MIR=MIR+KA*(IA-IB-IB)

IA=IB

GO TO 1

3 RETURN

END